

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

**III Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

11–16 марта 2019. Санкт-Петербург



Сборник тезисов
и список участников

Гатчина – 2019

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

**ЛШ Школа ПИЯФ
по физике конденсированного состояния**

ФКС-2019
11–16 марта 2019 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2019

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников ЛШ Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2019), 11–16 марта 2019 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the LШ PNPI School on condensed state physics (CSP-2019). (11–16 of March, 2019, Saint Petersburg.)

Проведению Школы ФКС-2019 оказали поддержку:

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

**Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»**

Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 19-02-20108 «ЛШ Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния».

Сборник подготовили А. И. Васильев, Н. Н. Губанова, Д. О. Сканченко,
О. В. Усманов, М. А. Швалева

Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции. Клубы любителей	4
Секция «Нейтронное рассеяние»	13
Секция «Рассеяние синхротронного излучения»	43
Секция «Материалы и минералы»	70
Секция «Биофизика и наука о жизни»	169
Секция «Теория физики твердого тела»	182
Секция «Методика моделирования и приборы»	212
Список участников	233

French contribution to the ESS instrumentation suite

X. Fabrèges, S. Longeville, S. Désert, F. Porcher, P. Bourges

Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France

The European Spallation Source (ESS [1]) is the next generation neutron source based on a linear protons accelerator. Currently in construction in Lund (Sweden), the source will be opened to external users in 2023. The initial instrument suite will be composed of 15 instruments covering most of the European scientific community needs in neutron scattering. Most of these instruments are built by European partners through an in-kind contribution.

In this context, France is involved in the construction of 6 instruments:

- 1) 3 diffractometers: MAGiC, DREAM and NMX
- 2) 2 spectrometers: CSPEC and BIFROST
- 3) 1 SANS: SKADI

An additional work package, covering the ESS needs for state of the art sample environment in low temperature, magnetic fields and high pressure is also under advanced discussions.

After an introduction on the facility and its specificities, an overview of the French contribution will be presented with an emphasis on the new instrumental and scientific opportunities that will emerge from the source's high brilliance.

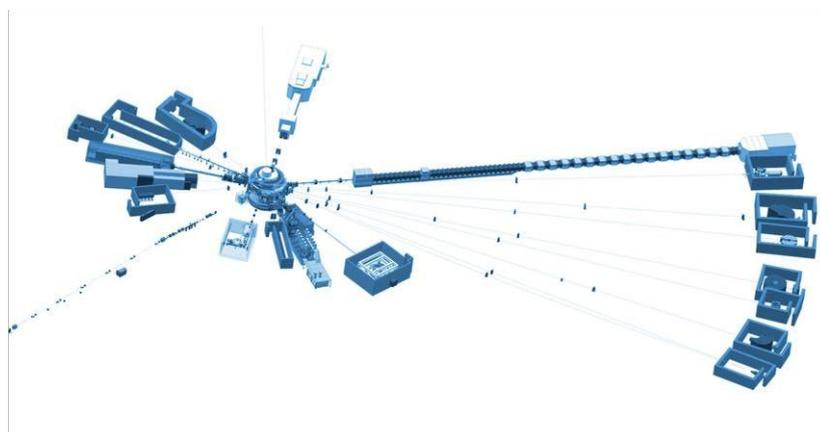


Fig. Artist's view of the ESS initial instrument suite at the horizon 2030

1. <https://europeanspallationsource.se/science-instruments>

Aubry-type transition by breaking analyticity in $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$

A. Gukasov

Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France

Spin-ladder compound $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ belongs to the class of aperiodic composite crystals displaying a diverse set of fascinating physical phenomena. Its crystal structure contains layers of ladders and layers of chains, separated by strings of Sr atoms. The layers are oriented in the crystallographic ac plane and stacked in alternating manner along the perpendicular b -axis. An incommensurability between the chains and ladders creates distortions, which lead to additional modulations of the crystallographic positions. Intriguing lattice dynamics have been predicted for aperiodic crystals that contain incommensurate substructures. In the case of weak interaction between subsystems, due to their incommensurability, they can slide past each other along the incommensurate direction with no energy cost.

However, this “phason” excitations remains gapless only in the case when the interaction between incommensurate subsystems is weak and when the displacement field can be described in terms of analytic functions of space. Hence this regime is expected to hold in a temperature range, when the modulation wave are weak and are not too far from sinusoidal in shape. This condition is satisfied in the composite compounds where the host lattice doesn't experience deformation from the guest one.

As has been shown by Aubry increasing of mutual interactions strength between subsystems or deviation from analyticity of interaction potential give rise to a transition by breaking analyticity (TBA) [1, 2]. He has shown that above a certain threshold of the interaction potential the corresponding incommensurate structure becomes locked at commensurate values and acquire the following features; phase defectability, a finite phason gap; coherence length and depinning field. In the talk I shall present our recent results of neutron scattering experiment demonstrating that the charge ordering process in $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ has a number of features of the transition by breaking analyticity.

1. S. Aubry. *Pysica* 7D, 240 (1983).
2. S. Aubry, P. Quemerai. *Breaking of Analyticity in Charge Density Wave Systems. Physics and Chemistry of Materials with Low Dimensional Structures*, vol. 11. Springer, Dordrecht (1989).

Неравновесная динамика стеклующихся спиновых систем

М. Г. Васин

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия

В своем докладе я попытаюсь в доступной форме изложить современные подходы статистической физики, применяемые при теоретическом описании динамики стеклующихся спиновых систем. Многие из этих методов развивались С. Л. Гинзбургом [1], или были предложены позднее под влиянием его работ. В докладе обсуждаются фундаментальные проблемы описания неравновесных неэргодических систем. Рассматриваются основные идеи келдышевской техники описания динамики неравновесных процессов в конденсированных системах, а также ее приложение к теоретическому описанию перехода спиновых систем в стекольное состояние.

1. С. Л. Гинзбург. Необратимые явления в спиновых стеклах, М.: Наука, 1989. – 152 с.

Каталитические биметаллические Pt/Pd наночастицы в кремнеземной матрице: тонкие пленки и композиты

Н. Н. Губанова^{1, 2}, В. А. Матвеев¹, О. А. Шилова^{2, 3}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

В последнее время наблюдается все возрастающий интерес к изучению структуры биметаллических наночастиц, в том числе Pt/Pd наночастиц, особенно в свете создания нового поколения топливных элементов. Свойства биметаллических Pt/Pd наночастиц определяются размерами и структурой, и могут заметно отличаться от свойств составляющих их металлов.

Целью данного исследования было получение биметаллических наночастиц Pt/Pd, равномерно распределенных в кремнеземной матрице, получаемых золь-гель методом и обладающих каталитическими свойствами. В ходе работы из кремнезольей, содержащих соли платины и палладия были сформированы тонкие пленки и композиты, содержащие каталитические биметаллические наночастицы Pt/Pd.

С помощью взаимодополняющих методов, таких как рентгенофазовый анализ, оптическая спектроскопия, рентгеновская рефлектометрия, сканирующая и просвечивающая микроскопия и др. была изучена структура пленок и композитов, а также были определены размеры наночастиц и их строение. Каталитическую активность наночастиц Pt/Pd оценивали с помощью вольтамперометрических характеристик.

Микробиологические топливные элементы

*А. Г. Иванова¹, М. С. Масалович^{1, 2}, Н. Н. Губанова^{1, 3}, О. А. Загребельный¹,
А. С. Галушко^{1, 4, 5}, Г. Г. Панова⁴, О. А. Шилова^{1, 2, 6}, И. Ю. Кручинина^{1, 6}*

¹ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

⁴ *Агрофизический научно-исследовательский институт, Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*

⁶ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

На сегодняшний момент разработкой биоэлектрохимических систем, а именно микробиологических топливных элементов (МТЭ), занимаются многие отечественные и зарубежные научные группы [1–4].

В целом по принципу работы МТЭ можно отнести к химическому топливному элементу, за исключением микроорганизмов – биокатализаторов, с помощью которых происходит превращение химической энергии топлива в электрическую.

Необходимо отметить, что принцип и механизм взаимодействия микроорганизмов, используемых для генерации электроэнергии в МТЭ, с различными композитными материалами электрода и мембраны в настоящее время недостаточно изучен. Помимо этого, основные методы и подходы для выбора необходимых композитных материалов для электродов и электролитической мембраны МТЭ отсутствуют, не выявлено влияние природы материала на биологическую активность микроорганизмов. В связи с этим актуальной и практически значимой задачей является разработка новых функциональных материалов для электрода и электролитической мембраны МТЭ, которые будут способствовать повышению его производительности.

В устном докладе будут представлены современное состояние и перспективы развития МТЭ, а также результаты исследований авторов доклада.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-03-01201 (код конкурса «а»).

1. С. А. Кусачева, С. И. Черняев, И. И. Сащенко, В. В. Гришакова, Ю. М. Жукова, Д. Н. Морозенко. Современные наукоемкие технологии, № 6, С. 51–54 (2016).
2. G. Reguera, K.P. Nevin, J.S. Nicoll, S.F. Covalla, T.L. Woodard, D.R. Lovley. J. Appl Environ Microbiol, V. 72, P. 7345–7348 (2006).
3. J. Winfielda, I. Gajdaa, J. Greenmana, I. Ieropoulosa. J. Bioresour Technol, V. 215, P. 296–303 (2016).
4. A.S. Galushko, A.G. Ivanova, M.S. Masalovich, O.A. Zagrebelnyy, G.G. Panova, I.Yu. Kruchinina, O.A. Shilova. J. Ceram. Sci. Technol. Vol.8, № 4, P. 1–22 (2017).

Нейтронная радиография и томография: метод, возможности и результаты

С. Е. Кичанов, Д. П. Козленко, Е. В. Лукин, Б. Н. Савенко

*Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка
Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия*

Метод нейтронной радиографии заключается в получении нейтронных изображений исследуемых объектов. За счет разной степени ослабления интенсивности нейтронного пучка при прохождении через компоненты различного химического состава или плотности получается важная информация о внутреннем строении исследуемых образцов с пространственным разрешением на микронном уровне [1]. Функциональным развитием метода нейтронной радиографии является нейтронная томография. В этом методе выполняется объемная реконструкция внутреннего строения исследуемого объекта из набора отдельных радиографических проекций, полученных при различных угловых положениях образца относительно направления нейтронного пучка.

Широкое практическое применение метода нейтронной радиографии и томографии в мультидисциплинарных исследованиях дало новый импульс в создании специализированных экспериментальных установок в мировых нейтронных центрах [2]. Одной из базовых установок Объединенного института ядерных исследований является высокопоточный реактор ИБР-2, который входит в число наиболее интенсивных импульсных нейтронных источников в мире. В лекции дается детальное описание экспериментальной станции [3] для проведения исследований с помощью метода нейтронной радиографии и томографии на этом реакторе. В качестве иллюстрации возможностей этого метода неразрушающего контроля приводятся несколько интересных результатов из различных областей науки: результаты исследований палеонтологических и геофизических объектов, метеоритов [4], уникальных объектов культурного наследия [5].

1. P. Vontobel, E.H. Lehmann et al., *Physica B: Condensed Matter*, 385–386, 475–480 (2006).
2. E.H. Lehmann, S. Peetermans and B. Betz, *Neutron News*, 26, 6–10 (2015).
3. D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov et al., *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 13, 346–351 (2016).
4. S.E. Kichanov, D.P. Kozlenko et al., *Meteoritics & Planetary Science*, 53, 10, 2155–2164 (2018).
5. S.E. Kichanov, I.A. Saprykina et al., *Journal of Imaging*, 4, 25 (2018).

Закрученные электроны: новый инструмент физики твердого тела

А. В. Майорова

*Центр перспективных исследований, Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

Около десяти лет назад был теоретически предсказан [1] такой принципиально новый инструмент для исследований физики микромира как закрученные или вихревые электроны. Через несколько лет экспериментальная реализация пучков закрученных электронов была осуществлена в электронных микроскопах [2–4]. Главной особенностью закрученных пучков является то, что они несут большую проекцию орбитального момента, и, как следствие, большой магнитный момент, который пропорционален величине данной проекции. В отличие от обычных плосковолновых состояний, для которых проекция углового орбитального момента m (ОАМ—orbital angular momentum) на направление распространения равна нулю, у закрученных электронов проекция ОАМ может достигать величин порядка $\hbar m = 1000\hbar$. Следовательно, все магнитные эффекты в процессах с участием закрученных электронов будут проявляться очень сильно. Например, вихревые электроны могут быть использованы для сканирования магнитных свойств поверхностей твердых тел и различных наноматериалов [5–7].

1. K.Y. Bliokh et al., Phys. Rev. Lett. 99, 190404 (2007).
2. J. Verbeeck, H. Tian, and P. Schattschneider, Nature (London) 467, 301 (2010).
3. M. Uchida and A. Tonomura, Nature (London) 464, 737 (2010).
4. B.J. McMorran et al., Science 331, 192 (2011).
5. V. Grillo, T.R. Harvey, F. Venturi et al., Nature Communications 8, 689 (2017).
6. K.Y. Bliokh et al., Phys. Rep. 690, 1 (2017).
7. S.M. Lloyd et al., Rev. Mod. Phys. 89, 035004 (2017).

Наука о сетях. История и современность

Н. Е. Савицкая

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В последнее десятилетие бурное развитие получила наука о сложных сетях – пространственных системах, представляющих собой совокупность узлов, соединенных связями. Это обусловлено в первую очередь тем, что множество объектов повышенного интереса, такие, как разнообразные связи в социальной сфере, Интернет, комплекс энергоснабжения, совокупность дорожных развязок, торговые, финансовые контакты могут быть представлены именно в виде сети.

Условно можно выделить два тесно связанных между собой направления в исследованиях сложных сетей. Первое из них связано с изучением их структурных свойств, второе – с исследованием особенностей протекания различных динамических процессов на сетях.

В настоящей лекции после того, как будут введены основные характеристики, описывающие сложную сеть, мы коснемся вопросов влияния структуры сети на характеристики развивающихся на ней процессов. Эта проблема будет рассмотрена в максимально доступной форме на примере развития лавины на сетях с различной топологией. Такой выбор продиктован практической значимостью данной задачи, описывающей, например, передачу заболеваний контактным или воздушно-капельным путем, распространение информации в социальных сетях, возникновение техногенных катастроф и многое другое.

Наночастицы «ядро – оболочка». Синтез, строение, свойства

О. А. Шилова^{1, 2}, Т. В. Хамова¹, А. М. Николаев^{1, 3}, А. С. Коваленко¹,
Г. П. Копица^{1, 3}, Г. Г. Панова⁴, М. М. Сычев^{1, 2}

¹ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

⁴ *Агрофизический научно-исследовательский институт, Санкт-Петербург, Россия*

Наночастицы ‘ядро-оболочка’ можно рассматривать как класс наноструктурированных материалов, который практически неисчерпаем. Поэтому для краткого сообщения обозначим граничные условия, чтобы выделить более узкую область. Речь пойдет только о частицах, у которых ядро не контактирует с внешней средой. Это отличает их от «двуликих» частиц Януса, все составные части которых контактируют с внешней средой (дендримеры, наночастицы в мицеллах и др.). Остановимся преимущественно на частицах, образованных неорганическими соединениями. Например, разрабатываются и изготавливаются коммерческие порошки, ядро и оболочка которых состоят из полупроводников типа II – VI, IV – VI и III – V, что позволяет использовать такие материалы в более широком диапазоне длин волн, защищать их от неблагоприятных воздействий. Биметаллические, оксидные или композитные наночастицы со структурой ‘ядро-оболочка’ играют важную роль в различных каталитических процессах. Особое внимание в последнее время уделяется магнитным частицам со структурой ‘ядро-оболочка’. Таким способом можно получать, например, мультиферроики. Обширна область применения наночастиц ‘ядро-оболочка’ в медицине и фармакологии, агротехнологиях (биовизуализация, контролируемое высвобождение и доставка лекарств, создание полезного бактериального фона). Формирование оболочки позволяет получать устойчивые суспензии, что важно, например, для «электронных чернил». Наночастицы со структурой ‘ядро-оболочка’ можно получать как физическими, так и химическими методами. Можно выделить методы мокрой химии, в частности, золь-гель синтез. Свойства композитов ‘ядро-оболочка’ зависят от материалов, составляющих ядро и оболочку, а также от размеров и морфологии наночастиц. Для установления корреляционных связей между условиями синтеза, структурой и свойствами наночастиц ‘ядро-оболочка’ очень важно применять современные методы исследования, в частности, методы просвечивающей микроскопии высокого разрешения, низкотемпературной адсорбции азота, малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и поляризованных нейтронов.

Nanoporous materials for magnetic and biomedical applications

P. Hrubovčák^{1, 2}, N. Kučerka^{1, 3}, A. Zeleňáková², V. Zeleňák⁴

¹ Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia

² Institute of Physics, Faculty of Sciences, P.J. Šafárik University, Košice, Slovakia

³ Department of Physical Chemistry of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Bratislava, Slovakia

⁴ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences, P.J. Šafárik University, Košice, Slovakia

Periodic nanoporous silica (PNS) with its perfect regular structure, biocompatibility, thermal stability and durability, and high specific surface is very promising material from the application point of view.

We have prepared series of nanocomposites, where PNS serves as a matrix in which nanoparticles of Gd_2O_3 or Fe_2O_3 are embedded. Such materials have already exhibited extraordinary large magnetocaloric effect [1] and applicability as contrast agents for MRI [2], while their utilization for targeted drug delivery is currently being examined. In this, the detailed information on the structure of as prepared nanocomposites is essential for understanding and tailoring their properties.

We have examined our PNS by means of small angle neutron scattering (SANS) and we proposed model assuming general features of the inner structure of the composite. By fitting the model to experimental data we are able to obtain information on matrix (size, shape and mutual distance of pores) as well as on size distribution and concentration of nanoparticles embedded in the pores. Hence, the combination of SANS experiments along with our model application appears to be suitable and effective tool for the revelation of inner structure of these kinds of nanocomposites.

1. A. Zeleňáková, P. Hrubovčák et al., Applied physics letters 109 (2016), 122412.

2. O. Kapusta, A. Zeleňáková et al., Acta Physica Polonica A 131(4) (2017), pp. 860–862.

Исследование фрактальных свойств ксерогелей диоксида циркония

Л. А. Азарова^{1, 2}, Н. Н. Губанова¹, Г. П. Копица¹, Е. Г. Яшина^{1, 2}, В. Пупич³,
А. Феоктистов³, Х. Э. Ёров⁴, Г. С. Петерс⁵, С. В. Григорьев^{1, 2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ JCNS at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ) Forschungszentrum Jülich GmbH,
Garching, Germany

⁴ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁵ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Диоксид циркония (ZrO_2) имеет множество промышленных применений, поэтому для различных задач важно уметь синтезировать структуры с заданными параметрами, такими как удельная поверхность, размер частиц и фрактальная размерность. Изменяя в ходе синтеза температуру отжига и рН, можно получать структуры с необходимыми, наперед заданными параметрами [1, 2]. В зависимости от способа синтеза, образцы обладают различной кристаллической структурой и температурой кристаллизации, а также фрактальной размерностью.

Методами малоуглового и ультрамалоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения определены параметры мезоструктуры ксерогелей диоксида циркония, синтезированных золь-гель методикой, при различных значениях рН и их эволюция на разных стадиях термической обработки ($60\div 500$ °С). Хорошо известно, что если кривая интенсивности малоуглового рассеяния описывается степенным законом ($I(Q) \sim Q^{-D}$), то степень D характеризует фрактальные свойства образца: $3 < D < 4$ для поверхностного фрактала, $2 < D < 3$ для объемного фрактала. Показано, что изначально частицы аморфного диоксида циркония формируют структуру поверхностного фрактала, однако в зависимости от условий синтеза, при повышении температуры отжига степень D может, как увеличиваться до $D = 4$ (твердая однородная частица), так и уменьшаться вплоть до $D = 3$ (по современным представлениям [3], логарифмический фрактал). На основе полученных данных предложена модель кристаллизации фрактальной структуры в условиях нехватки вещества, предполагающая рост кристаллов из исходно фрактальной структуры и учитывающая влияние связанной воды на образование кристаллов.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ. Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Нанотехнологии» и «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования».

1. V.K. Ivanov, G.P. Kopitsa et al., Russian Journal of Inorganic Chemistry, Vol. 54, No. 14, 2091–2106 (2009).
2. V.K. Ivanov, G.P. Kopitsa et al., Journal of Physics and Chemistry of Solids, 75, 296–299, (2014).
3. E.G. Iashina, S.V. Grigoriev, J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 9, 5–16 (2017).

Формирование скирмионной решетки в соединении $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с ростом концентрации Fe

*E. В. Алтынбаев^{1, 2, 3}, К. А. Пшеничный^{1, 2, 3}, A. Heinemann⁴, G. Chaboussant⁵,
N. Martin⁵, A. В. Цвяцценко³, С. В. Григорьев^{1, 2, 3}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Физический факультет Санкт-Петербургского государственного университета,
Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

⁴ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

⁵ *Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France*

Известно, что магнитная система всего ряда соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$, синтезированных при высоком давлении [1], в нулевом поле при низких температурах упорядочивается в спиновую спираль [2]. Анализ эволюции магнитной структуры FeGe во внешнем магнитном поле позволил обнаружить образование скирмионной решетки (СкР) или А-фазу, что свойственно всем известным геликоидальным магнетикам, основанным на взаимодействии Дзялошинского – Мория [3, 4]. Существование СкР в соединении MnGe при этом до сих пор однозначно не установлено.

В данной работе исследовалась фазовая диаграмма магнитное поле – температура для соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0.0, 0.1, 0.2$ и 0.3 . В результате удалось установить, что для чистого соединения MnGe в диапазоне температур $5\text{ К} < T < 200\text{ К}$ и полей $0\text{ Т} < H < 10\text{ Т}$ СкР не формируется. При этом уже в соединении $Mn_{0.9}Fe_{0.1}Ge$ А-фаза была обнаружена в широком диапазоне температур $20\text{ К} < T < 120\text{ К}$. Также установлено, что полевой диапазон области существования СкР растет с концентрацией x и оказывается наибольшим для $x = 0.3$, для которого А-фаза сосуществует с конической фазой при температурах $40\text{ К} < T < 140\text{ К}$, то есть, ограничена критическими полями H_{C1} и H_{C2} , $H_{C1} < H < H_{C2}$.

Мы связываем возникновение и увеличение области существования СкР в этих соединениях с линейным ростом величины взаимодействия Дзялошинского – Мория в соединениях $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с ростом x [5–7]. Из теории также следует, что величина константы Дзялошинского – Мория равна нулю в случае чистого соединения MnGe, что подтверждается отсутствием области существования СкР для этого соединения. Мы полагаем, что ширина температурной области существования СкР на фазовой диаграмме определяется наличием геликоидальных флуктуаций магнитной структуры, которые были обнаружены для этих соединений при температурах много ниже температуры магнитного упорядочения [8]. Следует также отметить, что период СкР, обнаруженной для соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0.1, 0.2$ и 0.3 , отличается от периода геликоидальной структуры не менее чем на 10 %. Это может быть связано с конкуренцией обменных взаимодействий, формирующих магнитную структуру соединений [8].

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (грант № 17 12 01050).

1. A.V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
2. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. Lett. Vol. 110. P. 207201 (2013).
3. Н. М. Чубова и др., ЖЭТФ. Т. 152. № 5. С. 933–943 (2017).
4. H. Wilhelm et al., Phys. Rev. Lett. Vol. 107. P. 127203 (2011).
5. T. Koretsune et al., Sci. Rep. 5, 13302 (2015).
6. J. Gayles et al., Phys. Rev. Lett. 115, 036602 (2015).
7. T. Kikuchi et al., Phys. Rev. Lett. 116, 247201 (2016).
8. E. Altynbaev et al., Physical Review B. Vol. 94 No. 17 (2016).

Исследование структуры мицеллярных систем в водных растворах анионных ПАВ при добавлении полиэтиленгликоля

*А. П. Артикульный^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 2}, М. В. Авдеев², Л. Алмаши³,
А. И. Иванов¹, Л. А. Булавин²*

¹ *Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка*

Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия

² *Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина*

³ *Центр физических исследований им. Вигнера, Будапешт, Венгрия*

Мицеллярные системы анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) олеат натрия (ОН) и додецилбензолсульфонатной кислота (ДБСК) используются для создания двухслойной стабилизирующей оболочки на поверхности магнитных наночастиц в водных феррожидкостях. При этом физикохимические свойства мицеллярных систем могут воздействуют на структурную организацию агрегатов магнитных частиц в магнитных жидкостях [1]. Свойства биосовместимости феррожидкостей можно улучшить путем добавления в их структуру полимера полиэтиленгликоля (ПЭГ) [2]. В этом случае полученная многокомпонентная система с мицелл-полимерным буфером имеет тенденцию к реорганизации агрегатной структуры [3]. Настоящая работа посвящена исследованию структурных и взаимодействующих параметров мицеллярных систем ОН и ДБСК под действием добавления водорастворимого нейтрального полимерного ПЭГ.

Тензиометрическим методом было обнаружено формирования ПАВ-полимерных комплексов. Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) вместе с исследованием поверхностного натяжения позволило нам определить ряд параметров мицелл, включая число агрегации, степень ионизации, морфологию мицеллы и обратную длину экранировки для различных составов смешанных растворов. Из анализа концентрационных зависимостей упомянутые выше параметры для различных соотношений ПАВ/полимер и для разной молекулярной массы ПЭГ (1–20 кДа) было установлено, что ПАВ-полимерные комплексы имеют морфологию мицелл близкой к сферической (отсутствует выразительный переход к эллипсоидам), большую степень ионизации (до 25 %) и большее значение длины обратного экранирования по сравнению с системами свободных мицелл [4]. Аналогичный эффект экранирования для систем SO-PEG (1 кДа) наблюдался в нашей предыдущей работе [5].

1. V.I. Petrenko, O.P. Artykulnyi et al., Coll. Surf. A. 541 (2018) pp. 222–226.
2. V. Závřšová et al. J. Mag. Mag. Mat. 323, 10 (2011) pp. 1408–1412.
3. M.V. Avdeev, A.V. Feoktistov et al., J. Appl. Cryst. 43, 5 (2010) pp. 959–969.
4. O.P. Artykulnyi., V.I. Petrenko et. al., J. Mol. Liq. 276 (2019) pp. 806–811.
5. V.I. Petrenko, M.V. Avdeev et al., Coll. Surf. A. 480 (2015) pp. 191–196.

Магнитная фазовая диаграмма одноосного гелимагнетика $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$

А. А. Быков¹, Н. Чубова¹, Ю. Kousaka², А. С. Овчинников³, J. Kishine⁴,
С. В. Григорьев^{1, 5}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Center for Chiral Science, Hiroshima University, Higashihiroshima, Hiroshima, Japan*

³ *Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия*

⁴ *The Open University of Japan, Tokyo, Japan*

⁵ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Магнитная структура соединения $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ исследовалась методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) с приложением магнитного поля в широком температурном диапазоне ниже $T_N = 130$ К. В таком соединении магнитная спираль ионов Cr^{3+} закручена вдоль оси с кристаллической решетки с пространственной группой $R\bar{6}_322$ [1–3]. Наблюдаемое в низких температурах дифракционное кольцо на карте МУРН интерпретировалось как рассеяние на магнитной спирали порошкообразного образца с периодом 485 Å. Интенсивность дифракционного пика уменьшалась с увеличением температуры и полностью исчезала при $T = 115$ К. Будучи приложенным перпендикулярно нейтронному пучку магнитное поле по-разному влияло на гранулы образца с волновым вектором спирали \mathbf{k} вдоль и поперек поля. Для гранул с \mathbf{k} перпендикулярным полю это приводило к появлению киральной солитонной решетки (КСР). Период КСР увеличивался при увеличении поля до исчезновения рассеяния при критическом поле $H_{C1} = 0.25$ Т. Переход от КСР к индуцированному ферромагнетизму сопровождается сильными ферромагнитными флуктуациями в широком диапазоне полей вблизи критического H_{C1} . Такие флуктуации хорошо видны на МУРН картах, как рассеяние в центре карты с малыми переданными импульсами $Q \sim 0$. Для гранул с \mathbf{k} параллельным полю система претерпевает серию метамагнитных переходов от гелимагнетика к коническому упорядочению и затем к индуцированному ферромагнетизму при критическом поле $H_{C2} = 1.25$ Т. Период конической структуры немного увеличивается (около 5 %) с увеличением поля, причем переход к индуцированному ферромагнетизму также сопровождается сильными ферромагнитными флуктуациями. На основе полученных данных приводится магнитная фазовая диаграмма поле-температура.

Работа поддержана грантом фонда РФФИ (№ 17-52-50013).

1. Y. Togawa et al. Phys. Rev. Lett., vol. 108, no. 10, pp. 21–25, 2012.
2. Y. Togawa et al. Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys., vol. 92, no. 22, pp. 1–6, 2015.
3. K. Tsuruta et al. Phys. Rev. B, vol. 93, no. 10, p. 104402, 2016.

Нейтрон-дифракционные исследования магнитных структур в редкоземельных ферроборатах $\text{Nd}(\text{Tb})\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$

*А. И. Васильев¹, И. В. Голосовский¹, А. А. Мухин², Е. Ressouche³, V. Skumryev⁴,
I. Urcelay-Olabarria⁵, Л. Н. Безматерных⁶*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

³ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

⁴ *Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, Barcelona, Spain*

⁵ *Departamento de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencia y Tecnología,
Universidad del País Vasco, Spain*

⁶ *Институт физики им. Л. В. Куренского СО РАН, Красноярск, Россия*

Ферробораты характеризуются комбинацией сильной кристаллической анизотропией одноосного характера и одноионной анизотропией редкоземельного иона. Магнитный порядок носит индуцированный характер и обусловлен, прежде всего, порядком в железной подрешетке. Мы определяем магнитную структуру в смешанных составах: $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ с $x = 0.1$ и $x = 0.2$. Поскольку в крайнем составе $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ реализуется магнитная структура с моментами, которые лежат в плоскостях, перпендикулярных гексагональной оси c – «легкая плоскость», тогда как в $\text{TbFe}_3(\text{BO}_3)_4$ моменты направлены вдоль оси c – «легкая ось», то интересно, что в «середине» этих крайних составов. Такое сильное различие в магнитных структурах обусловлено разной одноионной анизотропией и предполагает сложную магнитную структуру в смешанных составах, что является предметом исследований.

Определены магнитные структуры в смешанных составах $\text{Nd}_{0.9}\text{Tb}_{0.1}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ и $\text{Nd}_{0.8}\text{Tb}_{0.2}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, их температурная и полевая эволюция. Рассматривались модели, которые получаются из симметричного анализа возможных магнитных структур. Из-за большого числа сильно коррелируемых параметров уточнение магнитной структуры из нейтронографических данных не дает однозначного ответа. Поэтому искалось самосогласованное решение, которое включает жесткие соотношения между направлением и величинами магнитных моментов в редкоземельной системе и спинов Fe, обусловленные индуцированным характером магнитного порядка. Параметрами задачи являлись величины обменного расщепления уровней Nd^{3+} и Tb^{3+} , полученные из антиферромагнитного резонанса.

Пространственная группа в допированных соединениях оказалась $R32$ как в $\text{NdFe}_3(\text{BO}_4)$, а не $R3_121$, как в $\text{TbFe}_3(\text{BO}_4)_3$. Это ожидаемый результат, поскольку допирование Tb небольшое. Магнитный порядок в $\text{Nd}(\text{Tb})\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ оказался сложной неколлинеарной структурой, которую можно рассматривать как искаженную легкоосную структуру, вызванную слабыми асимметричными взаимодействиями. При более высоких температурах магнитная структура трансформируется в коллинеарную скошенную структуру.

Исследование структуры тонких пленок полистирол-фуллереновых нанокompозитов методом нейтронной рефлектометрии

М. Л. Карпець^{1, 2}, Т. В. Тропин¹, И. В. Гапон^{1, 2}, М. В. Авдеев¹, Л. А. Булавин²

¹ *Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка*

Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия

² *Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина*

Тонкие полимерные пленки имеют многочисленные технологические применения в различных промышленных и биомедицинских секторах [1]. Во многих случаях используемые пленки имеют сложную нанокompозитную структуру. Полимеры в тонких структурах могут проявлять необычные физические свойства из-за геометрических ограничений, налагаемых наличием поверхностей и наночастиц в матрице. Полистирол-фуллереновые пленки можно рассматривать как модельную систему для исследования этих свойств. Метод нейтронной рефлектометрии был успешно использован при изучении системы PS/C₆₀, позволив оценить структурные особенности упорядочения наночастиц в полимерной матрице [2].

Настоящая работа посвящена нейтронному исследованию структурной организации наночастиц в тонких пленках полистирол-фуллерен C₇₀. С помощью моделирования рассмотрены разные варианты структурной организации наночастиц в полимерной матрице (равномерное распределение, слой у подложки и возле поверхности полимера), сравниваются модельные спектры нейтронной рефлектометрии для этих случаев, оценивается качество подгонки модельных кривых без предварительной информации об организации наночастиц. В результате расчетов показано, что определение структурной организации наночастиц в тонких пленках нанокompозита возможно при массовой концентрации фуллеренов, превышающей 1 %.

Методом нейтронной рефлектометрии выполнено исследование серии образцов тонких пленок полистирола с разной концентрацией C₇₀. Растворы PS/C₇₀ и dPS/C₇₀ в толуоле были нанесены на кремниевую подложку методом спин-коатинга (скорость 2000 об/мин). Нейтронные измерения полимерных тонких пленок в диапазоне температур от 16 °С до 150 °С проводились на приборе ГРЭИНС ИБР-2, ОИЯИ.

1. E. Slaver. Polymer Thin Films (Scitus Academics LLC) 304 (2016).
2. M.A. Yaklin, P.M. Duxbury, M.E. Mackay. Control of nanoparticle dispersion in thin polymer films. Soft Matter, 4(12), 2441 (2008).

Нейтронные исследования распределения остаточных напряжений в тонкой пластине из стали марки AISI 410, изготовленной методом прямого лазерного выращивания

И. Д. Карпов^{1,2}, С. А. Рылов¹, П. А. Борисова¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Аддитивные технологии по праву получают все более широкое распространение в промышленности. Скорость, довольно высокая точность изготовления и огромная, по сравнению с традиционными методиками, экономия материала предоставляют новой технологии серьезные преимущества. Однако, как и любая новая технология, она нуждается в непрерывной модернизации и оптимизации.

Одной из особенностей метода прямого лазерного выращивания является наличие в получаемых образцах существенных остаточных напряжений, возникающих из-за большого градиента температур при производстве. Информация о внутренних напряжениях в изделиях является критически важной для грамотной организации производственных процессов.

Для исследований пространственного распределения остаточных напряжений в тонкостенных изделиях в ИЛИСТ СПбГПУ методом прямого лазерного выращивания, был изготовлен модельный образец, имитирующий детали больших линейных размеров. Образец представляет собой тонкую 2-мм пластинку из стали марки AISI 410, выращенную на жесткой массивной подложке из того же материала.

Нейтронно-дифракционные измерения внутренних деформаций/напряжений в образце были проведены на дифрактометре СТРЕСС исследовательского реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт». Размеры пробного объема (рассеивающей нейтроны области в образце) составляли 1(мм)*1(мм)*1(мм). При расчетах напряжений малая толщина пластинки (толщина на порядок меньше высоты и, тем более, длины) позволила использовать методику, не требующую информации о параметре решетки образца в ненапряжённом состоянии.

Работа выполнена на УНУ: НИК ИР-8 НИЦ КИ.

Исследование структур цементирующих материалов с добавлением графита для хранения радиоактивных отходов методами нейтронной радиографии и томографии

*М. Р. Кенесарин^{1,2}, С. Е. Кичанов¹, Д. П. Козленко¹, Б. Н. Савенко¹,
М. Балашою¹, К. М. Назаров¹, А. В. Руткаускас¹, Е. В. Лукин¹*

*¹ Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка
Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия*

² Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

На сегодняшний день актуален вопрос хранения радиоактивных отходов. Для этого создаются специальные хранилища, которые требуют постоянного мониторинга износа конструкций. Для продления срока эксплуатации таких хранилищ ведется поиск новых марок цемента. Особое внимание уделяется на коррозионную стойкость армирующих материалов бетонных конструкций при различных условиях окружающей среды, а также их микропоровой структуре, которая образуется на ранней стадии затвердевания цемента.

Для определения структурных характеристик цементных материалов и бетонов используются экспериментальные методы нейтронного рассеяния, направленные на получение подробных данных о фазовом анализе или особенностях кристаллической структуры, образовании наночастиц и зерен внутри матрицы, старения, трещинах и эволюции пор. Полученная структурная информация позволяет понять природу и происхождение механических и химических свойств цемента, предсказывая функциональные свойства, представляя пути оптимизации составного состава новых цементных материалов.

В работе представлены результаты исследования методами нейтронной радиографии и дифракции кинетика застывания и затвердевания цемента марки “СЕМ V” и “СЕМ V” с добавлением графита, который используется для постройки хранилищ радиоактивных отходов. Основной задачей являлось выявление факторов влияющих на формирование трещин и пор внутри бетонных образцов.

Эксперименты по нейтронной радиографии проводились на установке НРТ, по нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-12 высокопоточного импульсного реактора ИБР-2.

Было обнаружено формирование трещин на месте контакта алюминиевого контейнера и цементной пасты. Построена зависимость коэффициента ослабления нейтронного пучка цементной пасты с течением времени. Обнаружены аномалии в поведении ослабления нейтронного пучка связанные с началом процесса выхода газа и водяных паров при затвердевании цементной пасты.

Киральная симметрия магнитных кристаллов

А. В. Ковалев

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Киральная симметрия структуры кристалла оказывается необходимым условием существования в нем спонтанной намагниченности. Решение задачи о взаимосвязи допустимой симметрии кристалла и его физических свойств изложено в трудах академика Шубникова А. В., который, развивая идеи Пьера Кюри, создал фундамент кристаллофизики. Однако до сих пор при исследовании магнитных явлений практически игнорируются принципы Кюри и не рассматриваются возможные следствия их выполнения. В частности, часто пишут о кубической симметрии магнитной фазы железа и его сплавов, так как «слабые магнитоупругие искажения кристаллической структуры можно не учитывать».

Причиной существующих недоразумений оказывается история формирования понятий о принципах симметрии. Следует особо отметить, что до 1964 г. считалось совершенно невозможным нарушение T -четности в природных процессах. Но при любом магнитном фазовом переходе (МФП) происходит нарушение этой симметрии, что является очевидным следствием принципа Кюри–Неймана и подтверждается результатами многих экспериментальных работ. Более сложным является вопрос о нарушении принципа T -инвариантности [1], решение которого непосредственно связано с проблемой устойчивости намагниченного состояния.

В докладе рассматривается взаимосвязь собственной симметрии кристалла, постулатов Пьера Кюри и принципов инвариантности, что позволяет предложить простые решения некоторых известных задач физики магнитных материалов. Причиной существования постоянного магнита можно считать сильное нарушение принципа T -инвариантности при МФП, что невозможно обосновать в рамках современных теорий. Поэтому нами рассматриваются возможности экспериментального решения этой проблемы. Приводятся результаты изучения соответствующих публикаций и примеры выполненных нами и другими авторами экспериментальных работ. Предлагаются понятие «диссимметрия магнитных кристаллов по отношению к операции обращения времени» [2].

1. A.V. Kovalev. J. Mag. Mater. 300, e550 (2006).
2. А. В. Ковалев. Современная наука в теории и практике. Монография. Часть IV. М.: Изд-во «Перо», 2018. С. 6–40.

Исследование спиновой динамики в $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ методом неупругого рассеяния нейтронов

А. Н. Коршунов^{1,2}, I. Safiulina^{3,4}, J. Ollivier³, А. И. Курбаков^{1,2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

⁴ *École polytechnique fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland*

Антимонат $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ обладает слоистой кристаллической структурой с гексагональным упорядочением магнитных ионов Ni^{2+} в слоях. При этом магнитоактивные слои оказываются разделены друг от друга слоями, содержащими атомы щелочного металла. Измерения магнитной восприимчивости и теплоемкости показали наличие антиферромагнитного перехода при $T_N \approx 14$ К [1]. Температура Вейсса, рассчитанная по высокотемпературной части кривой восприимчивости принимает небольшое положительное значение ~ 8 К, что указывает на наличие сложной конкуренции ферро- и антиферромагнитных взаимодействий в $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$. Затем нами был проведен эксперимент по дифракции нейтронов при низкой температуре, который показал наличие дополнительных магнитных рефлексов, связанных с переходом системы из парамагнитной в магнитоупорядоченную фазу. Соответствующее магнитное упорядочение представляет собой структуру типа «зигзаг» [2] со спинами, ориентированными перпендикулярно сотообразной плоскости [3]. Для получения информации о спиновой динамике был проведен эксперимент по неупругому рассеянию нейтронов на времяпролетном спектрометре IN5 (ILL, Grenoble, France) при разных энергиях падающих нейтронов. Соответствующие температурные диаграммы позволили установить наличие магнитных возбуждений ниже температуры фазового перехода.

Теоретический анализ спектров проводился в рамках приближения линейной теории спиновых волн. При этом использовалась $J_1 - J_2 - J_3$ модель [2], где разным J соответствуют обменные магнитные взаимодействия для различных соседей на сотообразной решетке магнитных атомов. Предварительная обработка показала, что такое описание удовлетворяет полученным экспериментальным данным. При этом предполагается, что обменное взаимодействие между соседними магнитными слоями значительно меньше, чем взаимодействия внутри слоев, что соответствует низкоразмерной природе исследуемого объекта.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00226.

1. E.A. Zvereva et al., Physical Review B 92.14, 144401 (2015).
2. P.H.Y. Li, R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, and C.E. Campbell, Phys. Rev. B 86, 144404 (2012).
3. A.I. Kurbakov et al., Physical Review B 96.2, 024417 (2017).

Особенности магнетизма в $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$

А. Н. Матвеева¹, И. А. Зобкало¹, М. Meven², А. Sazonov², V. Hutanu²

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

НИИ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² *RWTH Aachen University, Garching, Germany*

Соединение $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$ принадлежит семейству «несобственных» мультиферроиков-ортоманганитов $RMnO_3$ (R-ион редкой земли), в них ярко проявляется взаимосвязь магнитных и электрических свойств. Появление сегнетоэлектрической поляризации в «крайних» составах – $DyMnO_3$, $HoMnO_3$ – описывается различными микроскопическими механизмами, соответственно, обратным эффектом Дзялошинского – Мория и обменно-стрикционным эффектом [1, 2].

Методами рассеяния нейтронов, включая дифракцию поляризованных нейтронов, проведены исследования монокристаллов $DyMnO_3$ и $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$.

Температурные зависимости параметров магнитных структур обоих исследованных соединений демонстрируют значительную зависимость от режима измерений – нагрев/охлаждение, что обусловлено взаимодействием двух магнитных подсистем – марганцевой и редкоземельной. Однако вид такого гистерезиса различается для $DyMnO_3$ и $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$, что свидетельствует о более сильном влиянии редкоземельной магнитной подсистемы на марганцевую в «родительском» соединении, чем в замещенном.

Произведены расчеты магнитной структуры $DyMnO_3$, реализующейся при разных режимах нагрев/охлаждение. Магнитная структура $DyMnO_3$ при 4К – спиновая циклоида с компонентами марганцевой подсистемы типа $AyAz$ и $GxAy$ диспрозиевой подсистемы. Наряду с несоразмерной структурой, ниже T_{NR} Dy упорядочен также в коллинеарную магнитную структуру $GxAy$ с волновым вектором $(0\ 0.5\ 0)$.

Определена магнитная структура соединения $Dy_{0.8}Ho_{0.2}MnO_3$ при 4К. Марганцевая подсистема упорядочивается в структуру спиновой спирали типа Ax , Ay , Az с полным магнитным моментом равным $3.5(4)\ \mu_B$. Магнитная структура редкоземельной подсистемы – также наклонная спиновая спираль типа Gx , Ay , Az . Магнитная структура замещенного соединения наследует тип конфигурации магнитную от обоих родительских соединений – $DyMnO_3$ и $HoMnO_3$. Замещение гольмием приводит к подавлению упорядочения редкоземельной подсистемы с собственным волновым вектором. Результаты расчетов находятся в хорошем согласии с измерениями намагниченности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 16-02-00545-а.

1. I.A. Sergienko, E. Dagotto, Phys. Rev. B 73 (2006) 094434.
2. Sergienko I.A., Sen C. & Dagotto E. Phys. Rev. Lett. 97, 227204 (2006).

Нейтронная томография объектов и изделий, полученных методом аддитивных технологий

М. М. Мурашев¹, В. П. Глазков¹, В. Т. Эм¹, Е. А. Сульянова²

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов,
Москва, Россия*

Аддитивные технологии, или технологии послойного синтеза, в настоящее время являются одним из наиболее динамично развивающихся направлений «цифрового» производства. Принцип заключается в том, что изделие создают, послойно добавляя материал различными способами, например, наплавляя или напыляя металлический порошок, композитный материал. Данная концепция призвана дополнить традиционные методы производства, основанные на удалении первичного материала (фрезерование, точение, строгание, шлифование).

На данный момент аддитивные методы изготовления изделий находятся в стадии бурного развития. По этой причине одной из сопутствующих задач является контроль произведенных изделий. Одним из таких методов неразрушающего контроля является нейтронная томография. Она позволяет получить информацию о внутренней структуре объектов макроразмеров, имеющих толщину до 100 мм (в зависимости от химического состава). На станции для комплексной радиационной диагностики «ДРАКОН» (исследовательский реактор ИР-8, НИЦ КИ) были проведены томографические исследования металлических изделий, полученных методами аддитивных технологий, предоставленных ВИАМ, а именно завихрителя фронтального устройства камеры сгорания (сплав ЭП648) и изделия с сетчатой структурой.

Методом нейтронной томографии удалось обнаружить дефект изделия с сетчатой структурой, возникший во время производства. Данный дефект может привести к изменению механических свойств изделия и, как следствие его разрушения в процессе эксплуатации.

Томография завихрителя фронтального устройства камеры сгорания позволила визуализировать внутреннюю структуру объекта. Скрытые внутренние дефекты выявлены не были.

Проведение данных исследований продемонстрировало возможности нейтронной визуализации, как метода неразрушающего контроля, применимого для объектов и изделий, изготовленных методами аддитивных технологий.

The Structural Analysis of Particulate-Filled Polymer Nanocomposites by Small-Angle Neutron and X-Ray Scattering Methods

A.A. Nabiyev^{1, 2}, O.I. Ivankov², A.M. Maharramov¹, A. Zhigunov³, A.I. Kuklin^{2, 4}

¹ ANAS Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³ Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic

⁴ Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia

Polymer composites are important commercial materials with various applications. As known, polymers filled with nanoscale fillers are recognized as polymer nanocomposites. Apparently, with addition of nanoscale fillers into polymers, robust materials can potentially be produced due to the synergistic effects (cooperating for enhanced effects) arising from the blending process [1].

Small-angle neutron scattering (SANS) measurements were performed at the time-of-flight YuMO spectrometer situated at IBR-2 pulsed reactor, JINR, Dubna, Russia [2]. The investigations by small angle X-ray (SAXS) method were performed on a pinhole camera Molecular Metrology SAXS System at the Institute of Macromolecular Chemistry CAS (Prague, Czech Republic) and on a Rigaku X-ray instrument with high-speed Cu rotating anode (SMAXS 3000 Point SAXS system, at MIPT, Dolgoprudniy, Russia) using a standard transmission configuration [3].

SANS experiments showed ZrO₂ nanoparticles mainly distributed in high-density polyethylene matrix as aggregates system [4]. Small angle neutron scattering (SANS) demonstrated in Guinier region that the internal structure of these aggregates could be characterized by the mass fractal dimensions of 2.1-2.5. Analysis of the SAXS data using Guinier's law revealed that the nanocomposites consisted of particles with a broad distribution of sizes from 41.8 nm to 104.5 nm. Analysis of the experimental data using Porod's law revealed that all the nanocomposite samples formed surface fractal aggregates behaviors. The SAXS results show that γ -irradiation of polyethylene leads to an increase in the content of its crystallites. A significant change was not observed even at irradiation doses of 500 kGy in the structure of the polymer composite.

The work was supported by the JINR-Romania Cooperation Programme Project of 21.05.2018 Order No. 323/92.

1. Bunjerd Jongsomjit, Joongjai Panpranot, Piyasan Praserttham, Materials Letters 61 (2007).
2. A.I. Kuklin, A.Kh. Islamov, and V.I. Gordeliy, Neutron News 16 16 (2005).
3. D.V. Soloviov *et al.* J. Phys.: Conf. Ser. **351** 012010 (2012).
4. A.A. Nabiyev *et al.* J. Phys.: Conf. Ser. **994** 012011 (2018).

Спиновые волны в редкоземельном ортоферрите HoFeO_3

A. K. Овсяников¹, И. А. Зобкало¹, W. Schmidt², V. Hutani³

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Julich Centre for Neutron Science Outstation at Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

³ *Institute of Crystallography RWTH Aachen University, Aachen, Germany*

В недавних исследованиях редкоземельных ортоферритов RFeO_3 (R – ион редкоземельного элемента) были обнаружены мультиферроичные свойства этих соединений. Появление сегнетоэлектрической поляризации наблюдалось при достаточно высоких температурах [1], что может приблизить их к использованию в качестве новых функциональных материалов передовых технологий. Сосуществование двух магнитных подсистем – железной и редкоземельной – приводит к сложной структуре магнитных взаимодействий. При изменении температуры возрастает роль Fe-R или R-R взаимодействий, что приводит к спин-ориентационным переходам [2]. Значительный вклад при этом дает относительно слабое антисимметричное взаимодействие Дзялошинского – Мория (ДМ), обуславливая появление слабого антиферромагнетизма. Предполагается, что именно магнитные взаимодействия в RFeO_3 , и, по-видимому ДМ, являются причиной возникновения поляризации.

В данной работе представлены результаты экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов на гольмиевом ортоферрите HoFeO_3 , которые были выполнены в ILL на спектрометрах IN12 и IN22. Полученные величины параметров обменных взаимодействий показывают, что основной вклад в формирование магнитной структуры определяют обмены внутри Fe подсистемы, где обмен Fe-Fe между ближайшими соседями $J_1 = -5.071$ мэВ, а обмен, следующий за ближайшими, $J_2 = -0.042$ мэВ. Искажение структуры вызвано взаимодействием ДМ с компонентами $D_x = -0.01$ и $D_z = -0.11$ мэВ. Также даны оценки величины взаимодействия между подсистемами Fe-Ho $J_3 = 0.026$ мэВ и взаимодействия внутри редкоземельной системы Ho-Ho $J_4 = 0.048$ мэВ. Такие значения параметров хорошо согласуются с данными полученными методами оптической [3] и рамановской спектроскопии [4].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-52-12047.

1. Y. Tokunaga *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 097205 (2008); Y. Tokunaga *et al.*, Nat. Mat. 8, 558 (2009); J.-H. Lee *et al.*, Phys. Rev. Lett 107, 117201 (2011); C.-Y. Kuo *et al.*, Phys. Rev. Lett. 113, 217203 (2014).
2. R. White, J. Appl. Phys. 40, 1061 (1969).
3. John C. Walling and Robert L. White Phys. Rev. B 10, 4737 (1974).
4. R.M. White, R.J. Nemanich, and Conyers Herring Phys. Rev. B 25, 1822 (1982).

Механизмы неупругости в Fe-(8-33%)Ga сплавах

В. В. Палачева, А. Карием К. М., И. С. Головин

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

Сплавы системы Fe-Ga принадлежат к классу высокомагнестрикционных (до 400 ppm) материалов, используемых в электромагнитных приводах, гидролокаторах, сенсорах специального назначения и элементах демпфирования. В системе Fe-Ga имеет место каскад фазовых превращений первого и второго рода, включая образование и растворение упорядоченных фаз при нагреве, охлаждении или изотермической выдержке. Тип и кинетика фазовых превращений зависит от состава сплавов, в том числе от микролегирования редкоземельными элементами. Фазовые превращения кардинально влияют на механические и функциональные свойства Fe-Ga сплавов.

Согласно равновесным диаграммам в сплавах системы Fe-Ga в изученном интервале концентраций (от 8 до 33 ат.%Ga) в зависимости от температуры имеются A1, A2, A3, B2, D0₃, D0₁₉ и L1₂ структуры. Низкотемпературные превращения в этой системе сильно затруднены, что приводит к сохранению при комнатной температуре высокотемпературных фаз (закалка) и возможности их распада при последующем нагреве (старение).

В работе исследуются термически-активируемые и структурно-обусловленные эффекты неупругости в литых сплавах Fe-Ga с содержанием (8-33)% Ga, в том числе дополнительно легированные Tb. Систематическое исследование сплавов системы Fe-Ga изучены в диапазоне температур от 0 до 600°C и частотах от 0,1 до 30 Гц при помощи динамического механического анализатора Q800 TA Instruments. Были измерены температурные зависимости внутреннего трения в поликристаллических закаленных образцах при нагреве и охлаждении.

Особое внимание уделено релаксации Зинера, обусловленной переориентацией пар атомов Ga как в неупорядоченной, так и упорядоченной решетке на основе α -железа. Показано, что упорядочение сплавов резко понижает магнитуду этого эффекта. Исследованы параметры эффекта неупругости, сопровождающего D0₃ – L1₂ превращение. Переходный эффект наряду с резким увеличением модуля упругости является чувствительным способом обнаружения перехода от метастабильной к стабильной структуре в сплавах Fe-Ga. Установлено влияние микролегирования Fe-Ga сплавов редкоземельным элементом (Tb) на неупругость, обусловленную фазовым превращением. Результаты исследований, полученные методом механической спектроскопии, анализируются вместе с данными калориметрии, дилатометрии, магнитометрии, рентгенографии и нейтронографии.

Измерение жесткости спиновых волн в ферромагнитных микропроводах методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов

К. А. Пшеничный^{1,2}, А. Хайнеман³, К. А. Чичай⁴, В. В. Родионова⁴, А. П. Жуков⁵,
С. В. Григорьев^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Исследовательский центр им. Гельмгольца, Геестхахт, Германия

⁴ Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия

⁵ Department Materials Physics, Faculty of Chemistry, San Sebastian, Spain

Представлены результаты измерения спин-волновой жесткости ферромагнитного микропровода, представляющего собой аморфную жилу соединения $\text{Fe}_{77.5}\text{Si}_{5.5}\text{B}_{15}$ в стеклянной оболочке [1, 2]. Диаметр жилы 10 мкм, а диаметр всего провода вместе со стеклянной оболочкой 21 мкм. Такие стеклянные магнитные микропровода с положительной магнитострикцией имеют доменную структуру типа Ландау – Лифшица, которая состоит в основном из одного большого домена с намагниченностью, ориентированной в осевом направлении. Исследования проводились методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов при наклонной геометрии магнитного поля при $T = 300$ К. Магнитное поле величиной 12.5 мТ прикладывалось вдоль оси микропровода, под углом 30° к пучку падающих нейтронов.

Метод наклонной геометрии основан на анализе лево-правой асимметрии в магнитном рассеянии поляризованных нейтронов, возникающей в случае, когда направление намагниченности в образце наклонено по отношению к волновому вектору падающего пучка [3, 4]. Асимметричный вклад был получен из разности интенсивностей рассеяния нейтронов, измеренных с поляризацией нейтронов вдоль и против магнитного поля. Жесткость спиновых волн была получена сравнением антисимметричного вклада в интенсивность рассеяния с модельной функцией. Рассеяние нейтронов на спиновых волнах сконцентрировано вблизи критического угла θ_c , который зависит от магнитного поля. Внешнее магнитное поле изменялось от 3.40 мТ до 41 мТ, при этом угол отсечки θ_c уменьшался в соответствии с уравнением: $\theta_c^2(H) = \theta_0^2 - (g\mu_N)\theta_0 / E$, где $\theta_0 = \hbar^2 / 2Dm_n$.

Величина жесткости спиновых волн ферромагнитного микропровода $\text{Fe}_{77.5}\text{Si}_{5.5}\text{B}_{15}$ при комнатной температуре равна $D = 218(5)$ мэВ \AA^2 .

1. L.V. Panina, M. Ipatov, V. Zhukova, A. Zhukov, Physica B 407, 2012, 1442–1445.
2. A. Zhukov, K. Chichay, A. Talaat, V. Rodionova, J.M. Blanco, M. Ipatov, V. Zhukova, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 383, 232–236, 2015.
3. С. В. Григорьев, Е. В. Алтынбаев, Н. Eckerlebe, А. И. Огороков. Поверхность. 2014. № 10, с. 71–78.
4. Огороков А. И., Рунов В. В., Топерверг Б. П. и др., Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43. С. 390.

Расчет сечения рассеяния нейтронов на спиновых волнах в спиральных магнетиках с симметричным обменом

К. А. Пшеничный^{1, 2, 3}, *Е. В. Алтынбаев*^{1, 2, 3}, *С. В. Григорьев*^{1, 2, 3}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

Получена аналитическая зависимость сечения малоуглового рассеяния нейтронов на спиновых волнах в спиральных магнетиках, формирующихся благодаря симметричному взаимодействию типа РККИ в кубических кристаллах без центра инверсии (пр. гр. $P2_13$). Такой тип РККИ взаимодействия формирует геликоидальную спиновую структуру с коротким периодом порядка 2-3 нм. Магнитное поле способно превратить спиновую спираль в коллинеарную структуру (аналог ферромагнетика). Предположено, что дисперсия спиновых волн в такой геликомагнетике (с симметричным обменом) с волновым вектором \mathbf{k}_s , поляризованном магнитным полем, большем критического поля H_{C2} перехода в поляризованную фазу имеет вид [1]: $E_q = A(q^2 - k_s^2)^2 + g\mu_B(H - H_{C2})$. В пределе малоуглового рассеяния нейтронов пространство переданных импульсов \mathbf{q} можно представить в виде плоскости с упругими компонентами импульса (q_x, q_y) и ортогональной ей оси с неупругой компонентой q_z , связанной только с переданной энергией. Дисперсионное соотношение и законы сохранения энергии и импульса в акте рассеяния формируют сложную геометрическую фигуру в \mathbf{q} пространстве, которая касается плоскости (q_x, q_y) в точках, описываемых кольцом с радиусом k_s , сферически вогнутая при $(q_x, q_y) < k_s$ и малых энергиях и сферически выпуклая при больших энергиях. Интеграл интенсивности рассеяния нейтронов по неупругой компоненте q_z пространства \mathbf{q} дает сечение рассеяния нейтронов на спиновых волнах в такой системе. Показано, что сечение рассеяния нейтронов на двумерной карте углов (θ_x, θ_y) представляет собой кольцо с центром в начале координат, срединной линией при $|q| = k_s$, соответствующей брэгговскому углу дифракции на спирали. Внешняя и внутренняя границы кольца непосредственно связаны с коэффициентом A дисперсионного соотношения. Случай рассеяния нейтронов на спиновых волнах в геликомагнетике с симметричным обменом сравнивается с аналогичным рассеянием в гелимагнетике с взаимодействием Дзялошинского – Мория.

1. Mitsuo Kataoka, Journal of the Physical Society of Japan Vol. 56, No. 10, October, 1987, pp. 3635–3647.

Нейтронные исследования внутренних напряжений в тонкостенном никелевом образце из сплава Inconel 625, изготовленном методом прямого лазерного выращивания

С. А. Рылов, И. Д. Карпов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Аддитивные технологии являются высокоперспективным методом производства в аэрокосмической, военной и других отраслях промышленности, в том числе из-за возможности изготавливать компоненты и детали, производство которых машинным методом не представляется возможным. Одной из характерных особенностей аддитивного производства является наличие значительных остаточных напряжений в изготавливаемых деталях. На характер распределения и величины напряжений влияет множество факторов: тип аддитивного производства, скорость выращивания, толщина слоя, температурные условия, материал подложки и др.

Благодаря большой глубине проникновения нейтронов в большинстве материалов метод нейтронной дифракции является в настоящее время единственным неразрушающим методом, способным измерить тензор деформаций внутри объемных кристаллических образцов толщиной до нескольких десятков миллиметров.

Эксперименты с образцом тонкой (2.2 мм) пластины из никелевого сплава Inconel 625, изготовленной методом прямого лазерного выращивания, проводились на нейтронном дифрактометре СТРЕСС исследовательского реактора ИР-8, НИЦ «Курчатовский институт». Изучались распределения деформаций/напряжений вдоль трех линий: горизонтальной на расстоянии 2 мм от края подложки, вертикальной на расстоянии 2 мм от одного из торцов пластины, вертикальной в центре пластины (на расстоянии 35 мм от торца). Пробный объем (объем, от которого наблюдается дифракция) составлял $1 \times 1 \times 1 \text{ мм}^3$. Для расчета напряжений был использован прием, учитывающий малую толщину пластины и позволяющий существенно упростить вычисления.

Работа выполнена на УНУ НИК ИР-8 НИЦ КИ.

Влияние тепловых колебаний на ограничения константы связи нового взаимодействия, полученные методом нейтронного рассеяния

А. Н. Рябцев^{1, 2}, Д. Д. Шапиро^{1, 2}, В. В. Воронин^{1, 2, 3}

¹ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

³ *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время в литературе обсуждается возможность существования нового взаимодействия в рамках расширения Стандартной Модели. Одним из методов установления ограничений на константу связи этого взаимодействия является метод порошковой дифракции [1]. В данной работе к уже существующим данным порошковой дифракции кремния, проведен расчет фактора Дебая – Валлера при температуре 293 К. Проанализировано влияние тепловых колебаний на ограничение константы связи нового взаимодействия. С учетом проведенных расчетов показано, что полученные ограничения улучшают уже имеющиеся в диапазоне радиуса взаимодействия $\lambda = 10^{-10} \div 10^{-13}$ м. Для улучшения существующих результатов запланирован полноценный эксперимент на порошковом дифрактометре SPODI реактора FRM II в Мюнхене.

1. В. В. Воронин, И. А. Кузнецов, Д. Д. Шапиро // Письма в ЖЭТФ. – 2018. – Т. 107. – № 1. – С. 3–5.

Исследование магнитной структуры $Rh_{1-x}Fe_xGe$ методом малоугловой дифракции нейтронов

Д. О. Сканченко^{1, 2}, Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, G. Chaboussant³, N. Martin³,
D. Honecker⁴, А. В. Цвященко², С. В. Григорьев^{1, 2, 5}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

³ *Laboratoire Leon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France*

⁴ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.*

⁵ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) была исследована температурная эволюция магнитной структуры соединений $Rh_{1-x}Fe_xGe$. Эти соединения, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20 [1], в которой отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского – Мория (ДМ) и образованию магнитной спирали [2, 3]. Соединение RhGe, напротив, демонстрирует сверхпроводящее состояние ниже $T_c = 4.5$ К и слабый ферромагнетизм ниже $T_m = 140$ К [4]. Оказалось, что замещение атомов Rh атомами Fe в соединениях $Rh_{1-x}Fe_xGe$ приводит к магнитному упорядочению. Температура упорядочения T_c растет с ростом концентрации x от нуля для RhGe до 278 К для FeGe [5]. При этом в соединениях $Rh_{1-x}Fe_xGe$ с концентрациями железа $0 < x \leq 0.3$ геликоидальная магнитная структура наблюдается лишь при температурах ниже 30 К, а для соединений с $x = 0.4$ и 0.5 волновой вектор k_s не был зарегистрирован в рамках эксперимента по МУРН и составляет менее 0.01 нм⁻¹. Это свидетельствует о переходе магнитной системы исследуемых соединений в ферромагнитное состояние. При концентрациях $0.6 \leq x \leq 1.0$ величина волнового вектора увеличивается с ростом x до значения $k_s = 0.09 \pm 0.005$ нм⁻¹ при $x = 1.0$ [5]. Поскольку величина волнового вектора k_s мала и меняется с температурой для концентраций $0.6 \leq x \leq 1.0$, то можно утверждать, что геликоидальная структура этих соединений удовлетворительно описывается моделью разработанной для FeGe [3]. Аналогичное обращение волнового вектора в ноль для промежуточных концентраций было обнаружено при исследовании магнитной структуры соединений $Fe_{1-x}Mn_xGe$ и $Fe_{1-x}Co_xGe$ [5,6]. Это явление было интерпретировано как переворот магнитной киральности с изменением концентрации x и позднее подтверждено расчетами [7]. Вопрос о природе геликоидальной магнитной структуры в соединениях с большим содержанием Rh ($0.0 < x \leq 0.3$) требует дополнительных теоретических и экспериментальных исследований.

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (грант № 17 12 01050).

1. A.V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
2. I.E. Dzyaloshinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46 1420 (1964).
3. P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C13 L881 (1980).
4. A.V. Tsvyashchenko et al., J. of All. and Comp., vol. 686, pp. 431–437 (2016).
5. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. Lett. 110, 207201 (2013).
6. S.V. Grigoriev, S.-A. Siegfried et al., Phys. Rev. B 90, 174414 (2014).
7. T. Koretsune, N. Nagaosa, and R. Arita, Sci. Rep. 5, 13302 (2015).

Сравнение глубокого неупругого нейтронного рассеяния на аморфных и поликристаллических бинарных сплавах Zr-Be

*А. А. Столяров¹, М. Крыстиньяк^{2,3}, Г. Ф. Сырых⁴, Р. А. Садыков¹,
Д. Армстронг², И. де Сильва², Д. Романелли², Ф. Фернандес-Алонсо^{2,5}*

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

² *ISIS, Лаборатория Резерфорда – Элтона, Оксфорд, Великобритания*

³ *Школа науки и технологии, Общественный Ноттингемский университет,
Клифтон Кампус, Ноттингем, Великобритания*

⁴ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

⁵ *Факультет физики и астрономии Университетского колледжа Лондона,
Лондон, Великобритания*

Использование спектрометров с обратной геометрией рассеяния VESUVIO и TOSCA на импульсном нейтронном и мюонном источнике ISIS в Великобритании дало возможность провести одновременно измерения дифракции высокого разрешения и комптоновского рассеяния, что позволило провести комплексное исследование структурной и динамической причин разупорядоченности в металлических стеклах Zr-Be. В заключение были проведены исследования поликристалла $Zr_{30}Be_{70}$ и аморфного сплава $Zr_{40}Be_{60}$ в широком температурном диапазоне от 10 до 300 К. Впервые, нейтронная дифракция высокого разрешения дала возможность исследовать структурную композицию поликристаллического $Zr_{30}Be_{70}$. С помощью метода Ритвельда было выявлено, что поликристаллическая система состоит из трех различных структурных фаз: гексагональной фазы Be_2Zr с симметрией $P6/mmm$ -87.11 %, второй гексагональной фазы Be_5Zr с точечной группой симметрии $P6/mmm$ – 12.89 %, а также следов третьей орторомбической фазы с неопределенным составом. Общая стехиометрия образца, полученная из дифракционных данных, находилась в превосходном согласии с результатами НКР: оба результата приводили к формуле $Zr_{30}Be_{70}$. Результаты обработки данных, полученных с помощью неупругого нейтронного рассеяния, хорошо согласуются с теоретическими данными, полученными рекурсивным методом. Данные по неупругому рассеянию сравнивались с распределениями ядерного момента в Zr и Be, полученных из анализа данных НКР. Систематическое различие в результатах для аморфного и поликристаллического образцов Zr-Be наблюдалось на всем температурном диапазоне, которое объясняется сглаживанием низкочастотной моды при переходе из кристаллической фазы в аморфную.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (грант № 16-12-10065).

Спиновая и кристаллическая структура фрустрированного магнетика $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$

А. Е. Суслопарова^{1,2}, А. Н. Коршунов^{1,2}, А. И. Курбаков^{1,2}, М. Д. Кучугура^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Соединения $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ принадлежит семейству A_2MXO_4 ($\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Ag}$; $\text{M} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Zn}, \text{Cd}$; $\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$), которое весьма разнообразно по типам структур и демонстрируемым свойствам. Ортогерманаты и ортосиликаты переходных и щелочных металлов используются в различных электрохимических устройствах, в связи с чем, электрические и химические свойства хорошо изучены, в отличие от их физических и магнитных свойств.

По данным синхротронной порошковой дифракции, полученной на линии BM25, ESRF, образец $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ принадлежит ромбической сингонии, пространственная группа $\text{Pmn}2_1$. При более подробном рассмотрении видно, что структура основывается на двухслойной гексагональной плотной упаковке. В ней ионы Li (позиция 4b), Ge и Mn (позиция 2a) находятся в тетраэдрах, на вершинах которого в позициях 4b (O1) и 2a (O2,3) находятся ионы кислорода (рис.).

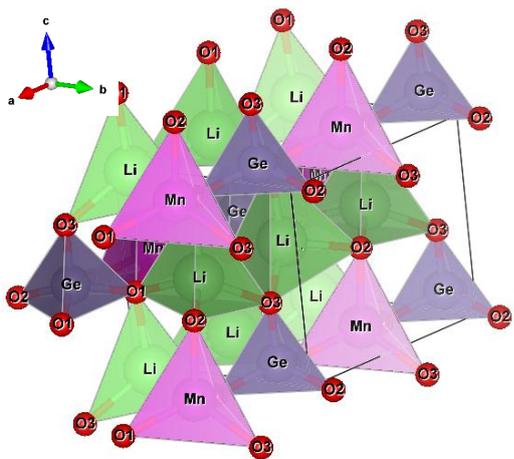


Рис. Кристаллическая структура $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$

Для определения спиновой структуры в упорядоченном состоянии и ее температурной эволюции были проведены нейтронные исследования на порошковом дифрактометре DMC, PSI, Швейцария. В результате профильного анализа была построена модель спинового состояния при температуре 1,6 К. Магнитная подрешетка ионов марганца основывается на треугольной геометрии, а, при наличии антиферромагнитного дальнего порядка такая система является фрустрированной

из-за наличия конфликта взаимодействий между ближайшими соседями. Магнитная структура соизмерима при температуре ниже температуры Нееля = 8 К и описывается волновым вектором $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ – магнитная ячейка в два раза больше кристаллографической по всем направлениям.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 18-12-00375.

Исследование физико-химических характеристик и особенностей структурирования водных растворов производных эндометаллофуллеренов

*М. В. Суясова², В. А. Орлова¹, А. А. Шперх¹, М. К. Мервис¹, Д. Н. Орлова²,
В. П. Седов²*

¹*Школа БиоТоп, Лаборатория непрерывного математического образования,
Санкт-Петербург, Россия*

²*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Целью данной работы являлось исследование физико-химических характеристик, особенностей структурирования, а также биологического воздействия различных производных фуллеренов и эндометаллофуллеренов (ЭМФ). Для этого были синтезированы гидроксипроизводные эндометаллофуллеренов лантаноидов и комплексы эндометаллофуллеренов лантаноидов с биосовместимым полимером – поливинилпирролидоном (ПВП).

Методом капиллярной вискозиметрии обнаружена немонотонная зависимость относительной вязкости водных растворов производных фуллеренов и ЭМФ от температуры. Установлено, что ПВП – производные обладают существенно большей относительной вязкостью по сравнению с гидроксипроизводными эндометаллофуллеренов.

Методом малоуглового нейтронного рассеяния обнаружено, что структурная организация водных растворов ПВП – производных ЭМФ не меняется в диапазоне концентраций 0,5–5% масс. В растворах обнаружены малые группы радиусом $R_1 \sim 1-2$ нм и крупные объединения агрегатов с радиусом корреляции $R_2 \sim 12-16$. Изменение типа металла внутри углеродной оболочки практически не сказывается на физических параметрах кластеров.

Для водных растворов производных фуллеренов и ЭМФ проведен сравнительный анализ биологических свойств, позволивший выявить различия между типами производных. С помощью теста «Силы подкисления» обнаружено более существенное влияние гидроксипроизводных ЭМФ на жизнеспособность дрожжей, чем ПВП – производных при тех же концентрациях растворов.

Результаты работы носят фундаментальный характер и могут быть полезны при внедрении водорастворимых производных фуллеренов и эндометаллофуллеренов в биомедицину в качестве МРТ-контрастирующих и изотопных препаратов.

Моделирование малоуглового рассеяния нейтронов на нанопористых материалах

А. Н. Тюлюсов^{1, 2}

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

Нанопористые материалы на основе оксида кремния являются перспективными для создания фильтров частиц нанодиапазона, демпферов с высоким удельным энергопоглощением для различных отраслей экономики. Поэтому важным вопросом является исследование внутренней структуры таких материалов, в том числе методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН).

В работах, где измеряется МУРН, обычно определяется характерный размер единичного рассеивателя и удельный объем, занятый рассеивателями в образце. Естественным является способ определения параметров неоднородностей, основанный на аппроксимации экспериментальной кривой модельной по методу наименьших квадратов, быстроедействие которого существенным образом зависит от времени вычисления одной линии МУРН. Таким образом, необходимо иметь возможность численного моделирования МУРН с возможно большей долей в виде аналитических решений.

Представлены аналитические результаты для точно решаемой модели прямоугольной пространственной решетки цилиндрических каналов, а также численные расчеты для материала МСМ-41. Вычисления углового распределения интенсивности МУРН проводились на основе метода моделирования, развитого в работе [1] и основанного на теории [2].

Важным преимуществом предлагаемого подхода является его естественное обобщение на случай многократного рассеяния.

1. Ю. Г. Абов, Ф. С. Джепаров, Н. О. Елютин и др., Письма в ЖЭТФ 78, 1011 (2003).
2. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, Письма в ЖЭТФ, 72, 518 (2000).

Поиск новых межнуклонных взаимодействий в рассеянии нейтронов на ядре

Д. Д. Шапиро^{1, 2}, В. В. Воронин^{1, 2, 3}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

Известно, что в природе существует 4 вида взаимодействия, однако сейчас в рамках расширения к Стандартной модели физики частиц широко обсуждается существование других взаимодействий, переносимых новыми, неизвестными бозонами [1, 2]. В данной работе обсуждается применение метода нейтронного рассеяния для поиска нового короткодействующего взаимодействия и наложения ограничений на константу связи такого взаимодействия.

Суть метода состоит в осуществлении эксперимента по рассеянию нейтронов на порошке кремния (порошковая дифракция) и получении из дифрактограммы информации о зависимости амплитуды рассеяния от переданного импульса (или от угла рассеяния). В рамках данной работы был проведен расчет, показывающий состоятельность этой идеи. Кроме того, исходя из реальных данных, полученных на реакторе FRM II, были вычислены ограничения на константу связи. Показано, что новая оценка не уступает уже имеющимся, что является хорошей мотивацией к проведению полноценного эксперимента.

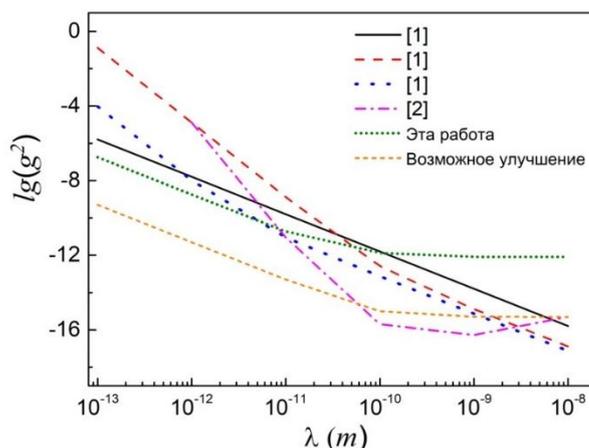


Рис. Ограничения на константу связи

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России 3.3838.2017/4.6.

1. V.V. Nesvizhevsky, G. Pignol, K.V. Protasov, Phys. Rev. D 77, 034020 (2008).
2. Y. Kamiya, K. Itagaki, M. Tani, G.N. Kim, and S. Komamiya, Phys. Rev. Lett. 114, 161101 (2015).

Эффект аномального пропускания в случае динамического рассеяния ограниченных пучков нейтронов на совершенных кристаллах

Й. Шмайсер^{1,2}, А. Н. Тюлюсов^{1,2}, Н. О. Елютин¹

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

В экспериментах по рассеянию нейтронов широко применяются апертурные системы для коллимации и уменьшения угловой расходимости пучка. Также их применение может быть продиктовано целями опыта, как, например, сканирование пространственной зависимости свойств объекта исследования. В теории динамической дифракции возникает необходимость рассмотрения задачи динамического рассеяния при конечных размерах пучка, для которой уже не будет применимо приближение плоских или сферических волн.

В данной работе рассматривается влияние ограниченности апертуры нейтронного пучка на эффект «аномального пропускания» – аналога эффекта Борманна в рентгеновской кристаллооптике – при рассеянии нейтронов на совершенных поглощающих кристаллах. На основе модели в работе [1], описывающей поведение нейтронной волны в кристалле с возможностью решения динамической задачи дифракции производного волнового пакета, были рассчитаны модельные инструментальные линии для спектрометрических схем Брэгг-Брэгг, Брэгг-Лауэ, Лауэ-Брэгг, Лауэ-Лауэ на примере слабопоглощающего кристалла Ge в области слабой зависимости сечения от длины волны и для InSb в области длин волн, близких к резонансу поглощения.

1. Ю. Г. Абов, Н. О. Елютин, А. Н. Тюлюсов, ЯФ 65, 1933 (2002).

Крупномасштабная структура хроматина: фрактальная глобула или логарифмический фрактал?

Е. Г. Яшина^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ Курчатовский институт, Гатчина, Россия

В работе рассмотрены две физические модели для описания крупномасштабной структуры хроматина в ядре биологической клетки, находящейся в интерфазном состоянии: модель фрактальной глобулы (ФГ) и модель логарифмического фрактала (ЛФ).

Фрактальная (складчатая) глобула – это модель одномерной полимерной цепи плотно заполняющей пространство без самопересечений, аналогом которой во фрактальной геометрии является кривая Пеано, или любая другая кривая, полностью заполняющая трехмерное пространство (Гильберта, Госпера и т. д.) [1]. Её размерность Хаусдорфа D_H равна 3 [2]. Логарифмический фрактал – это пространственная модель объекта, который характеризуется не степенной, как в случае однородного фрактала (D_H имеет одно значение во всех его областях), а логарифмической корреляционной функцией. Кроме того, отсюда вытекает необычное масштабное свойство ЛФ: $\gamma(r/n) = \gamma(r) + \ln(n)$, т. е. уменьшение масштаба в n раз дает аддитивную добавку к корреляционной функции, что опять-таки отличает его от классического фрактала, характеризующегося мультипликативной добавкой [3].

Основываясь на классификации фрактальных объектов, разработанной в методологии малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) [4], показано, что модель ФГ не удовлетворяет экспериментальным данным МУРН на ядрах биологических клеток. Напротив, модель ЛФ хорошо описывает экспериментальные данные МУРН, а следовательно, и является хорошим приближением для описания крупномасштабной структуры хроматина [3]. Кроме аддитивного масштабирования, модель ЛФ предсказывает, что ядерное пространство заполнено хроматином ровно наполовину, в то время как остальная его половина составляет межхроматиновые пустоты, заполненные нуклеоплазмой, в которой осуществляются различные ядерные процессы. Таким образом, в структурной организации хроматина сбалансированы две противоборствующие тенденции: увеличение площади поверхности хроматина в ядре клетки (доступности для внешних агентов) и уменьшение объема занимаемого хроматином (компактности ядра).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 17-02-00313 А.

1. A. Grosberg, Y. Rabin, S. Havlin and A. Neer, Europhys. Lett., 23 (5), pp. 373–378 (1993).
2. B. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York, 1983.
3. E.G. Iashina, E.V. Velichko, M.V. Filatov, W.G. Bouwman, C.P. Duif, A. Brulet, and S.V. Grigoriev, PRE 96, 012411 (2017).
4. Е. Г. Яшина, С. В. Григорьев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 9, 5–16 (2017).

X-ray study of the crystal structure of $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$

Y.I. Aliyev^{1, 2}, Y.G. Asadov¹, A.O. Dashdemirov²

¹ *Institute of Physics, NAS of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan*

² *Department of Physics and Technology, Azerbaijan State Pedagogical University, Baku, Azerbaijan*

The study of crystal structures of Cu containing binary compounds in semiconductors materials are of particular importance. The electron diffraction study of thin films for nonstoichiometric composition of $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$ in the Cu-Te system found β' and β'' - phases which crystallized in the hexagonal symmetry with the following parameters of the unit cell: $a = 2a_0 = 8.28$, $c = c_0 = 7.22$ Å, space group: P3m1, $Z = 2$ and $a = a_0 = 4.17$, $c = 3c_0 = 1.65$ Å, space group: P6m2, $Z = 16$, respectively, $a_0 = 4.234$, $c_0 = 7.344$ Å parameters of the hexagonal lattice for Cu_2Te . In other works the structural transformations in the $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$ single crystal and it was shown that the single crystals parameters at ordinary temperature are: $a = a_0 = 4.17$, $c = 3c_0 = 21.65$ Å, become two-phase at $T = 630$ K, i.e. consist of the hexagonal phase with parameters: $a = 4.234$, $c = 7.344$ Å and face-centered cubic (FCC) phase with parameters $a = 6.09$ Å.

In this work, we have been used the method of direct synthesis, each ampoule was filled with Cu and Te precursors in the needed quantities for each composition and evacuated to 10^{-3} Pa vacuum, then sealed. The starting components involved in the composition had the following purities: Cu and Te are high purity. In order to achieve the same synthesis conditions, the ampoule with corresponding compositions were in turn stirred into the furnace so that the ampoule was in the stable temperature zone of the furnace. The temperature of furnace has been slowly raised to the melting point of tellurium and maintained at this temperature for 3 hours for full diffusion of molten with tellurium and them with copper. After this, the temperature of furnace was slowly raised at the rate of 50 K/hour above the melting point of Cu_2Te . After two hours at this temperature with the cyclic vibrating of ampoule with samples slowly cooled to 473 K and were kept at this temperature for 20 hours in order to homogenize of obtained samples.

The determination of phase compositions has been carried out by X-ray phase analysis to establish an identity of the synthesized samples. 12 diffraction reflections were recorded at room temperature from the natural surface of the layered single crystal of $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$ in the range of angles $10^\circ \leq 2\theta \leq 100^\circ$. $\text{Cu}_{1.75}\text{Te}$ powder patterns are uniquely induced on the basis of hexagonal lattice with parameters $a = 4.17$, $c = 21.65$ Å.

Синтез интенсивности зеркального рассеяния для решения обратной задачи в рефлектометрии тонких пленок

С. Б. Астафьев, Л. Г. Янусова

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Рефлектометрическая интенсивность зеркального отражения в рамках кинематического приближения теории рассеяния имеет вид интеграла Фурье от электронной плотности рассеивающей среды [1]. Можно показать, что в случае ступенчатой модели профиля плотности интенсивность рассеяния в зависимости от угла скольжения представима в виде суммы косинусов:

$$I(q) = \frac{1}{q^4} \cdot \sum_{i=0}^M C_i \cos(qd_i),$$

где q – проекция вектора рассеяния на нормаль к поверхности образца, равная $4\pi / \lambda \sin \vartheta$;

λ – длина волны, ϑ – угол скольжения;

N – число слоёв ступенчатой модели;

M – число слагаемых суммы равно $N(N+1)/2$;

C_i – коэффициенты, связанные с величиной электронной плотности;

$\{d_i\}$ – набор толщин слоёв модели, а также все возможные комбинации сумм, граничащих между собой слоёв вида $d_1 + d_2$, $d_1 + d_2 + d_3$, $d_2 + d_3$ и т. п.

Это выражение – формальное представление интенсивности зеркального рассеяния суммой $M(N)$ косинусов (N -«слоёв»). Применяя процедуру подгонки к экспериментальной кривой [2], определяем наборы параметров $\{C\}$ и $\{d\}$, где $\{d\}$ содержит в себе характерные толщины слоёв и координаты интерфейсов, описывающих профиль плотности. Эти величины можно использовать в дальнейшем для построения и уточнения этого профиля электронной плотности. Отметим независимость предлагаемого подхода от каких-либо априорных знаний об исследуемом образце и от экспериментального диапазона углов скольжения.

Применимость предложенного метода демонстрируется на ряде модельных примеров. Алгоритм реализован в программном аналитическом комплексе BARD [2].

1. Р. Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, М., 1950.

2. С. Б. Астафьев, Б. М. Щедрин, Л. Г. Янусова // Кристаллография. 141, 1 (2012).

Вклад аппаратной функции в карты обратного пространства трехкристальной геометрии дифракционного эксперимента

И. И. Аткин^{1, 2}, Н. В. Марченков^{1, 2}, А. Г. Куликов^{1, 2}

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

В работе рассматривается подход к моделированию карт обратного пространства в методе трехкристальной рентгеновской дифрактометрии. Особенностью подхода является использование спектрально-угловых диаграмм распределения рентгеновского излучения, что позволяет визуализировать двумерную диаграмму спектрально-углового «состава» рентгеновского пучка после взаимодействия с каждым из элементов схемы и обеспечивает учет вклада аппаратной функции экспериментальной установки. Разработанные алгоритмы позволяют проводить расчеты для широкого класса источников излучения (от рентгеновской трубки с любым материалом анода до источника синхротронного излучения) и рентгенооптических элементов (щелей и монохроматоров). Проведено сравнение результатов моделирования и эксперимента для дисперсионной геометрии дифракции, которое подтверждает адекватность предлагаемого подхода и его применимость для моделирования картины дифракции, отвечающей реальному эксперименту трехкристальной дифрактометрии.

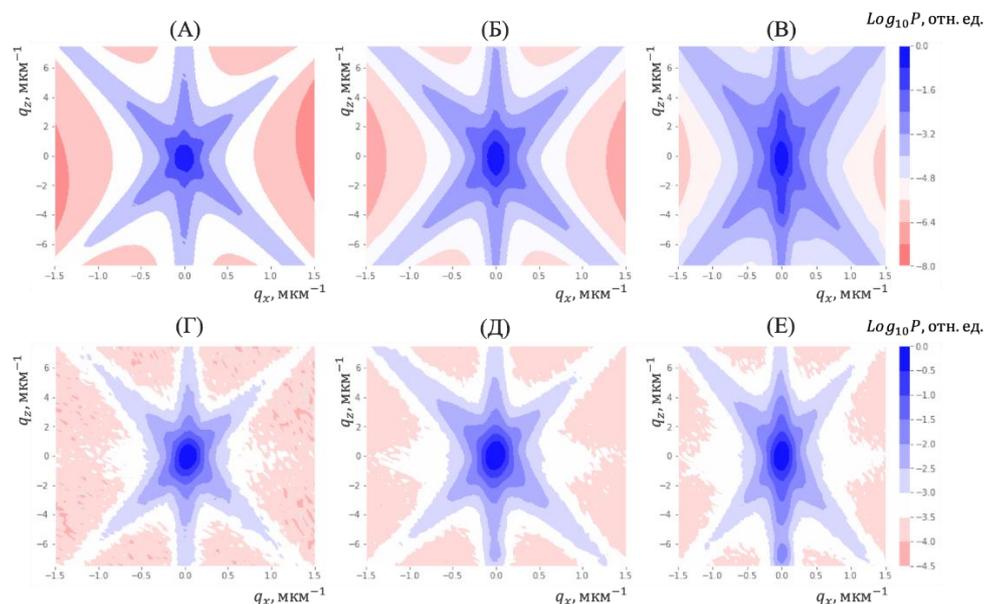


Рис. Трехкристальные кривые дифракционного отражения в обратном пространстве для разных размеров коллимационной щели: $S = 0.03$ мм (А, Г), $S = 0.3$ мм (Б, Д), $S = 0.8$ мм (В, Е). Теоретические (А, Б, В) и экспериментальные (Г, Д, Е)

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00410 мол_а).

Особенности поведения фононных и магнонных мод в гетероструктурах «мультиферроик – сегнетоэлектрик»

*Д. С. Бабарикин¹, Д. В. Стрюков², А. С. Анохин², А. С. Михейкин¹,
А. Г. Разумная¹*

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

² Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия

В тонких пленках мультиферроика феррита висмута BiFeO_3 был обнаружен гигантский магнитоэлектрический эффект, который указывает на факт разрушения пространственно-модулированной структуры в пленках, вызванный деформацией элементарной ячейки из-за несоответствия параметров решетки пленки и подложки. Магнитные и/или сегнетоэлектрические свойства гетероструктур сильно чувствительны к эпитаксиальным напряжениям, поэтому стрейнинженерия является мощным способом управления физическими свойствами мультиферроиков.

Пленки феррита висмута BiFeO_3 выращены на подложке $(001)\text{MgO}$ по блочному механизму роста методом ВЧ катодного распыления с использованием в качестве буферного слоя сегнетоэлектрика $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ при варьировании состава x . Изучение гетероструктур методом рентгеновской дифракции показало, что пленки характеризуются псевдотетрагональной симметрией при комнатной температуре. Определено, что степень тетрагонального искажения слоев $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ возрастает с увеличением концентрации Ba, в то время как в слоях BiFeO_3 она остается практически неизменной. Высокотемпературные исследования спектров комбинационного рассеяния света в широком диапазоне температур 295–900 К и частот от 50 до 1600 см^{-1} показали, что интенсивность полосы 1250 см^{-1} , соответствующей плотности состояний двухмагнонных возбуждений, линейно понижается при повышении температуры. Анализ температурного поведения полосы 1250 см^{-1} позволяет предполагать, что в изученных пленках BiFeO_3 антиферромагнитный фазовый переход происходит в диапазоне температур 600–700 К. Показано, что использование сегнетоэлектрических буферных слоев $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ с разной степенью тетрагонального искажения позволяет управлять деформацией пленок BiFeO_3 , возникающей в результате несоответствия параметров решеток в смежных слоях, и тем самым искусственно варьировать свойства данных структур.

Влияние последовательности облучения ионами аргона и кислорода на химический состав и топографию армко-железа

*О. Р. Бакиева, И. К. Аверкиев, Т. С. Картапова,
А. Н. Бельтюков, А. А. Колотов*

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

В настоящей работе рассматривается влияние последовательности облучения аргон-кислород и кислород-аргон на изменения в химическом составе и топографии поверхности. Исследование химического состава ионно-модифицированной поверхности проведено методом РФЭС (рентгено-фотоэлектронной спектроскопии) и электронной Оже-спектроскопии. Изменение топографии поверхности в результате ионного облучения отслеживалось методом атомно-силовой микроскопии. Полученные результаты показали, что облучение в последовательности аргон-кислород приводит к более глубокому проникновению ионов кислорода вглубь армко-железа по сравнению с облучением кислородом без предварительной обработки ионами аргона. При ионной модификации в последовательности кислород-аргон исследования химического состава показали, что железо находится в металлическом (не окисленном) состоянии. При этом анализ химического состава поверхности проведенный методом Оже-электронной спектроскопией показал присутствие аргона в количестве 3–5 ат.%

Работа выполнена по плану НИР, № гос. Регистрации АААА-А17-117022250040-0, при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ № 16-43-180765, проекта Президиума РАН № 18-10-2-25.

Измерение динамики остаточных напряжений в меди после облучения электронным пучком

И. И. Балаш^{1, 2}, А. С. Аракчеев^{1, 2}, Б. П. Толочко^{1, 3},
М. Р. Шарафутдинов^{1, 3}, А. Н. Шмаков⁴

¹ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

³ Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

⁴ Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

В термоядерном реакторе плазма оказывает импульсное тепловое воздействие на стенки дивертора вакуумной камеры. Из-за этого эффекта в материале дивертора появляются остаточные напряжения и деформации, что впоследствии приводит к разрушению материала. В то же время под воздействием высокой температуры плазмы напряжения могут ослабевать. Возникла гипотеза: эффект релаксации может вернуть материал в исходное состояние за время между двумя последовательными импульсами, предотвращая его разрушение. Чтобы проверить эту гипотезу, необходимо разработать метод измерения остаточных напряжений и деформаций. Синхротронное излучение рассеивается в узлах кристаллической решетки, следовательно, остаточные напряжения могут быть измерены по изменению угла рассеяния СИ с помощью рентгеновской дифрактометрии. В качестве объектов исследования были выбраны медные образцы, в которых создавались остаточные напряжения с помощью облучения электронным пучком. Остаточные напряжения и деформации были измерены на станции «Аномальное рассеяние» на канале № 2 ВЭПП-3. Динамика релаксации напряжений измерялась на станции «Дифракционное кино» на канале №5b ВЭПП-3 с различными скоростями изменения температуры. После динамических измерений образцы были исследованы на станции «Аномальное рассеяние» на наличие остаточных напряжений.

1. Аракчеев А. С., Шмаков А. Н., Шарафутдинов М. Р. и др. Моделирование взаимодействия плазмы с первой стенкой термоядерного реактора – измерения остаточных механических напряжений в вольфраме после облучения на установке ГОЛ-3 // Журнал структурной химии. – 2016. – Том 57, № 7. – С. 1445–1450.
2. Trunev Yu.A., Arakcheev A.S., Burdakov A.V. et al. Heating of tungsten target by intense pulse electron beam // AIP Conference Proceedings, 1771, 060016 (2016).
3. Шмаков А. Н., Толочко Б. П., Дементьев Е. Н., Шеромов М. А. Модернизированная экспериментальная рентгенодифракционная станция на канале №2 вывода синхротронного излучения накопителя электронов ВЭПП-3 // Журнал структурной химии. – 2016. – Том 57, № 7. – С. 1395–1400.
4. Evdokov O.V., Titov V.M., Tolochko B.P., Sharafutdinov M.R. *In situ* time-resolved diffractometry at SSTRC // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. – 2009. – Vol. 603, N 1 – 2. – P. 194–195.

Измерение температуры поверхности вольфрама во время импульсного нагрева лазерным излучением

Л. А. Вайгель

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

В термоядерном реакторе под действием импульсных плазменных нагрузок происходит импульсный нагрев стенки дивертора. Неоднородное распределение температуры приводит к появлению упругих и пластических деформаций и механических напряжений. Градиент температуры и значительные напряжения ведут к увеличению накопления водорода, механическому разрушению конструкций и другим вредным для реактора факторам.

Для диагностики облучаемого материала используется рассеяние синхротронного излучения из накопителя ВЭПП-4 в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения. Динамика деформаций вольфрама наблюдается по изменению формы и положения дифракционного пика при импульсном нагреве его поверхности лазерным излучением. Тепловая нагрузка лазерного излучения соответствует плазменной нагрузке в термоядерном реакторе. В качестве материала для экспериментов был выбран вольфрам, так как он является одним из перспективных материалов для стенок реактора.

Для нормировки измерений деформации необходимо знать распределение температуры поверхности материала. Для измерения зависимости температуры от времени нагрева разработан пирометр.

Пирометр состоит из фотодиода, трансимпедансного усилителя и оптической системы, которая собирает рассеянное тепловое излучение с нагретой области на поверхности образца и направляет его на фотодиод. Кроме того, разработана система прицеливания, которая позволяет точно попадать лазером в нужную область на образце и сильно экономит время для подготовки к эксперименту.

При импульсном нагреве вольфрама лазерным излучением происходит смещение дифракционного пика. Измеренная пирометром температурная зависимость позволила оценить удельное смещение дифракционного пика.

1. A.S. Arakcheev, A.I. Ancharov, V.M. Aulchenko et al. Status of dynamic diagnostics of plasma material interaction based on synchrotron radiation scattering at the VEPP-4 beamline 8 // Physics Procedia. 2016. V. 84. pp. 184–188.

Динамика решетки FeSi – исследование методом неупругого рассеяния синхротронного излучения

Г. А. Вальковский^{1, 2}, А. А. Мистонов¹, М. Б. Смирнов¹, С. В. Григорьев^{1, 2, 3}

¹ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

² *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Интерес к FeSi обусловлен тем, что этот материал, являясь полупроводником в основном состоянии, переходит в металл при повышении температуры от 100 до 300 К [1]. При этом многие физические свойства (упругие модули, теплоёмкость, объем элементарной ячейки) меняются необычным образом.

В данной работе впервые динамика решетки FeSi изучена с использованием неупругого рассеяния синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция). Измерена дисперсия фононов в целом ряде высокосимметричных направлений по всей зоне Бриллюэна. Найдены фононы, испытывающие аномально сильное смягчение при нагревании в диапазоне 100–300 К. Расчеты динамики решетки на основе модели Борна фон Кармана показали, что частоты аномальных фононных мод наиболее чувствительны к взаимодействию между ближайшими атомами железа (Fe-Fe). Основной движущей силой аномального отклика решетки, по-видимому, выступает изменение электронной подсистемы, приводящее к металлизации и изменению взаимодействия Fe-Fe.

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (грант № 17-1201050).

1. J.M. Tomczak, J. Phys.: Condens. Mater. 30, 183001 (2018).

Модельно-независимый метод определения локального атомного строения с разрешением по глубине в многослойных металлических наногетероструктурах

Д. И. Девятериков, Д. А. Пономарев, Ю. А. Бабанов

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Тонкие многослойные металлические пленки являются важным классом наноматериалов, что обусловлено их уникальными магнитотранспортными и электротранспортными свойствами. Эти свойства в значительной степени определяются локальным атомным строением плёнок в области их интерфейсных слоёв. Существующие методы анализа локальной структуры, такие как EXAFS и мёссбауэровская спектроскопия, налагают ограничения на возможность изучения отдельных участков в глубине исследуемого образца, либо, как в случае с фотоэлектронной спектроскопией, являются разрушающими. В данной работе предлагается новый метод исследования слоистых наноструктур, предполагающий комбинирование данных рентгеновской рефлектометрии и EXAFS-спектроскопии с угловым разрешением. Помимо описания способа проведения соответствующих измерений, в докладе также приводится алгоритм последовательного решения двух взаимосвязанных обратных некорректных задач, возникающих в процессе обработки экспериментальных данных по рефлектометрии и EXAFS-спектроскопии и результаты апробации метода на многослойных тонких плёнках железо/хром с гигантским магниторезистивным эффектом. Результатом работы алгоритма являются парные корреляционные функции входящих в состав образца компонентов, характеризующие среднее количество атомов определенного сорта в первой координационной сфере атомов данного компонента на определённой глубине. Доклад сопровождается описанием перспектив дальнейшего совершенствования и применения метода.

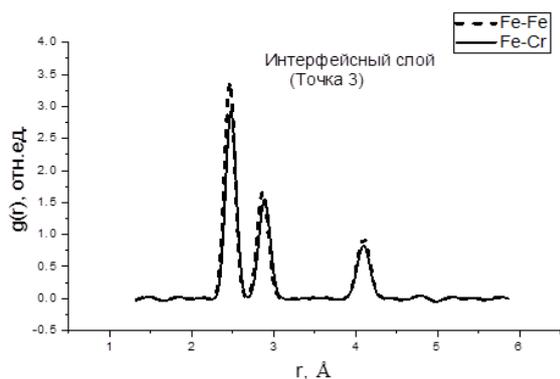


Рис. 1. Парциальные парные корреляционные функции Fe-Fe Fe-Cr, соответствующие атомам в глубине интерфейсного слоя исследуемого образца

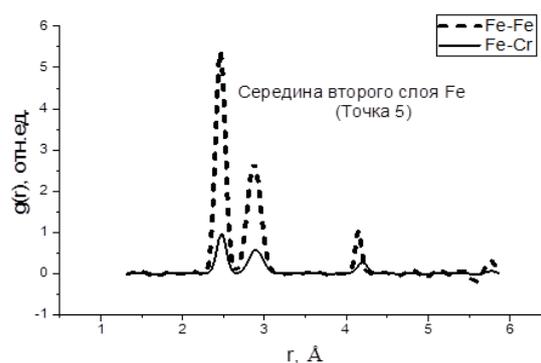


Рис. 2. Парциальные парные корреляционные функции Fe-Fe Fe-Cr, соответствующие атомам в глубине слоя железа исследуемого образца

1. Yu.A. Babanov, V.V. Vasin, D.A. Ponomarev, D.I. Devyaterikov, L.N. Romashev, V.V. Ustinov, *Thin Solid Films* 656, 44 (2018).

Измерение динамики дифракции синхротронного излучения на мозаичном монокристалле вольфрама при импульсном нагреве и восстановление динамики распределения деформаций в образце

С. Р. Казанцев¹, А. С. Аракчеев²

¹ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

² *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия*

В термоядерном реакторе ожидаются интенсивные импульсные тепловые нагрузки на стенку дивертора, которые могут привести к возникновению пластических деформаций, и как следствие, к последующему разрушению дивертора [1]. Для исследования механизма возникновения данных деформаций необходимо измерять их динамику во время импульсной тепловой нагрузки. В настоящее время в ИЯФ СО РАН идет разработка динамической диагностики данных деформаций на основе метода быстрой дифрактометрии [2]. Данный метод заключается в измерении дифракционной картины рассеянного на образце монокристалла вольфрама пучка синхротронного излучения (СИ), и последующем восстановлении деформации образца по форме дифракционного пика. При равномерном по поверхности нагреве монокристалла, будет происходить его расширение, что приведет к искривлению отражающей кристаллической плоскости, а значит к изменению формы дифракционного пика. Того же эффекта можно добиться с помощью вращения образца, в результате можно зарегистрировать некий набор базисных функций для восстановления деформаций в образце по дифракционной картине. Но для этого нужно уметь решать прямую задачу о рассеянии СИ на монокристалле вольфрама. Работа проводилась в режиме дифракции на просвет, в модели учитывались поглощение СИ и мозаичность образца, использовалось приближение кинематической теории дифракции. В пакете Wolfram Mathematica была написана программа для моделирования процесса рассеяния пучка СИ в мозаичном монокристалле вольфрама для расчета аппаратных функций для задачи восстановления деформации образца по форме дифракционного пика. Были проведены численные расчёты и сравнение с экспериментальными данными, которое выявило расхождение по форме дифракционного пика, которое было учтено использованием более точной функции распределения, описывающей разориентированность кристаллической структуры монокристалла. Также в работе представлены первые результаты по восстановлению распределения деформаций в образце при импульсном нагреве.

1. Ikeda K., Nuclear Fusion 2007. V. 47. N. 6.

2. Arakcheev A.S. et al., Physics Procedia 2016. V. 84. P. 184–188.

Измерение распределения массы вдоль потока микрочастиц

*С. И. Кременко^{1, 2}, К. А. Тен², Э. Р. Прууэл², А. О. Кашкаров²,
И. А. Рубцов^{1, 2}*

¹ Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

² Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева, Новосибирск, Россия

При сильном ударном воздействии на металлическую пластину с ее свободной поверхности (СП) выбрасывается поток частиц разных размеров (ударно-волновое «пыление»). Выход УВ на СП вещества приводит к развитию микровозмущений на СП металлов и последующему образованию мелкодисперсной фракции, распределенной в пространстве по размерам и скоростям. Развитие процесса роста неустойчивости на СП металла и, соответственно, характеристики пылевого облака зависят от фазового состояния материала, условий нагружения и т.д. Диапазон размеров частиц от единиц мкм до сотен мкм. Предполагается, что в потоке есть и более мелкие частицы, но существующие методики их пока разрешить не могут. Для исследования процесса пыления используются разные методики, такие как фото и рентгенография, пьезодатчики, лазерные методики [1, 2].

В СО РАН для исследования пыления используются ускорительные методики: рентгенография и метод мало-углового рентгеновского рассеивания (МУРР).

В ИЯФ СО РАН на ускорительном комплексе ВЭПП-3 – ВЭПП-4 построены две станции для исследования быстрых (в том числе взрывных) процессов. На станциях есть возможность измерять как проходящее излучение (поглощение), так и мало-угловое рентгеновское рассеяние синхротронного излучения (СИ) [2]. В качестве детектора используется прецизионный быстродействующий детектор DIMEX [3]. С помощью регистрации проходящего СИ были проведены исследования потоков микрочастиц со свободной поверхности из меди. Получены распределения массы вдоль микроструй образующихся из канавок микронного размера. С помощью МУРР определялось наличие наночастиц в пылевом потоке.

Получено распределение массы вдоль потока микрочастиц с СП меди и олова. УВ создавалась с помощью детонации мощных прессованных энергетических материалов.

1. А. Л. Михайлов, В. Л. Огородников, В. С. Сасик, В. А. Раевский, А. И. Лебедев и др. // ЖЭТФ, 2014, т. 145, вып. 5, стр. 892–905.
2. К. А. Тен, Э. Р. Прууэл, А. О. Кашкаров, И. А. Рубцов, М. В. Антипов и др. // Физика горения и взрыва, 2018, т. 54, №5, стр. 103–111.
3. L.I. Shekhtman, V.M. Aulchenko, V.N. Kudryavtsev, V.D. Kutovenko, V.M. Titov et al. // Physics Procedia. 2016. Vol. 84. pp. 189–196.

Определение локальной структуры материалов по рентгеновским спектрам поглощения

А. Кузьмин

Институт физики твердого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия

Рентгеновская спектроскопия поглощения (РСП) с использованием синхротронного излучения является современным и эффективным методом исследования локальной атомной структуры в упорядоченных и неупорядоченных материалах. Локальность метода зависит от степени теплового и структурного беспорядка, присутствующего в материале, и ограничена длиной свободного пробега электрона, возбуждаемого при поглощении рентгеновского кванта. Метод РСП одинаково хорошо применим для исследования кристаллических, нанокристаллических и аморфных твердых тел, а также жидкостей и газов. Отдельно стоит отметить применимость метода для исследования примесных атомов и многокомпонентных систем, а также возможность проведения экспериментов по РСП в широком диапазоне температур и давлений.

Информация о структуре материала содержится в осциллирующей части коэффициента поглощения рентгеновского излучения (*X-ray absorption fine structure, XAFS*), расположенной за краем поглощения. Теоретическое описание XAFS, основанное на формализме многократного рассеяния, достаточно хорошо разработано [1]. Тем не менее, извлечение структурной информации из XAFS по-прежнему остается сложной проблемой, стимулирующей разработку новых подходов.

В докладе будут изложены основы метода РСП и рассмотрены традиционные решения для интерпретации XAFS. Также будет обсуждаться использование перспективных подходов, основанных на методе молекулярной динамики [2], обратном методе Монте-Карло [3] и искусственной нейронной сети [4].

1. J.J. Rehr and R.C. Albers, *Rev. Mod. Phys.* 72, 621 (2000).
2. A. Kuzmin and J. Chaboy, *IUCrJ* 1, 571 (2014).
3. A. Kuzmin et al., *Rad. Phys. Chem.* (2019) (doi: 10.1016/j.radphyschem.2018.12.032).
4. J. Timoshenko et al., *Phys. Rev. Lett.* 120, 225502 (2018).

Исследование структуры и динамики решетки двухслойных пленок титаната бария-стронция

*Я. Ю. Матяш¹, А. С. Анохин², Д. В. Стрюков²,
В. М. Мухортов², А. Г. Разумная¹*

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

² Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия

В последнее время внимание многих исследователей направленно на изучение многослойных структур. В таких структурах возможно управление свойствами за счет деформаций, возникающих в элементарной ячейке. Тонкие сегнетоэлектрические пленки титаната бария-стронция представляют большой интерес для микроэлектромеханики, а также СВЧ-техники, так как они обладают высокой диэлектрической проницаемостью, диэлектрической нелинейностью и низкими диэлектрическими потерями.

Полученные методом ВЧ-катодного распыления, двухслойные гетероструктуры $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{TiO}_3/\text{MgO}$ (BST0.8/BST0.4/MgO) и $\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{TiO}_3/\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{MgO}$ (BST0.4/BST0.8/MgO) с толщиной слоев 45, 75 и 300 нм исследовались методом рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС).

Рентгенодифракционные исследования показали, что структура BST0.8/BST0.4/MgO с толщиной слоев 300 нм характеризуется следующими параметрами решетки: $a = 3.92$, $c_1 = 4.073$ и $c_2 = 3.999$ Å. Для структуры BST0.4/BST0.8/MgO той же толщины они составили: $a = 3.98$, $c_1 = 4.071$ и $c_2 = 4.008$ Å. Появление дополнительных параметров решетки может быть связано с наличием интерфейса между слоями гетероструктуры.

Изучение поляризованных спектров КРС гетероструктур выявило особенности в поведении мягкой моды $E(\text{TO})$ в зависимости от последовательности нанесения слоев BST0.8 и BST0.4. Определено, что различие в частотах мягкой моды для гетероструктур BST0.8/BST0.4/MgO (102 см^{-1}) и BST0.4/BST0.8/MgO (97 см^{-1}) с толщиной слоев 300 нм является минимальным и составляет ~ 5 нм. С уменьшением толщины слоев в гетероструктурах BST0.4/BST0.8/MgO частота мягкой моды уменьшается, в то время как в структурах BST0.8/BST0.4/MgO она остается практически неизменной. Это может свидетельствовать об изменении деформации слоев BST0.8 и BST0.4 в зависимости от последовательности их нанесения.

Определение структурного фазового перехода в сложных халькогенидах, используемых в качестве материалов фазовой памяти

И. И. Николаев, Н. А. Григорьева

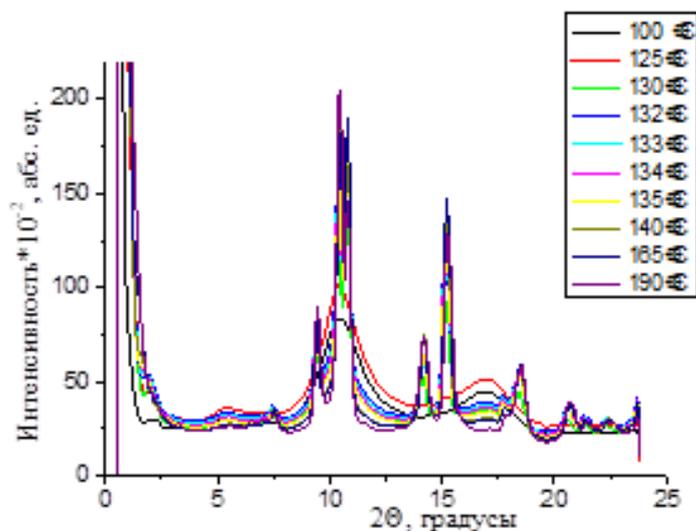
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В современных устройствах энергонезависимой фазовой памяти (ФП) – оптические диски форматов DVD-RW и Blu-Ray и электрическая память формата PCRAM в качестве рабочего материала активной области применяются халькогенидные полупроводники системы Ge-Sb-Te (GST), которые демонстрируют стабильность, высокую скорость фазовых переходов, большой оптический контраст и различие удельного сопротивления на несколько порядков между аморфным и кристаллическими состояниями.

Методом термического напыления в вакууме предварительно синтезированного поликристаллического соединения $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ были получены аморфные пленки состава Ge-Sb-Te согласно результатам электронной дифракции.

Элементный анализ показал, что на интерфейсах тонкой пленки наблюдается отклонение от стехиометрического состава GST-225: граница раздела пленка/воздух более обогащена сурьмой, в то время как граница раздела пленка/подложка более обогащена теллуром относительно состава GST-225, при этом интегрально элементный состав полученных пленок соответствует стехиометрическому соединению $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Расчет отношения $\text{Ge}/(\text{Sb}+\text{Te})$ на различных срезах по толщине пленки в сравнении с теоретическими значениями для GST-225, GST-147 и GST-124, указывает на возможное сосуществование двух кристаллических фаз GST-225 и GST-147 при отжиге пленки.

С помощью *in situ* метода дифракции синхротронного излучения в скользящей геометрии были получены дифракционные картины на пленках Ge-Sb-Te в аморфном и кристаллическом состояниях в интервале температур от 100 °C до 190 °C, что соответствует интервалу температур вблизи фазового перехода аморфная – кристаллическая фаза. Показано, что интенсивность рассеяния синхротронного излучения описывалась суммой следующих вкладов: не зависящее от температуры фоновое рассеяние, рассеяние на крупномасштабных неоднородностях в пленках (рассеяние Порода), интерференционное рассеяние на границах пленка/воздух и пленка/подложка, рассеяние на областях пленки с низким атомным заполнением, рассеяние на ковалентно связанной атомной структуре аморфной пленки Ge-Sb-Te с ближним порядком, рассеяния на кристаллографических плоскостях – дифракционные (брэгговские) максимумы.



Определено, что исходная аморфная пленка в диапазоне температур $120\text{ °C} \leq T \leq 140\text{ °C}$ кристаллизуется в две кристаллические фазы – кубическую GST-225 с пространственной группой $Fm\bar{3}m$ и тригональную GST-147 с пространственной группой $R\bar{3}m1$. На первом этапе появляются крупномасштабные неоднородности, характеризующиеся «малоугловым фоном», затем при $T = 122.99\text{ °C}$ появляется тригональная фаза GST-147, за которой следует кристаллизация фазы GST-225 начиная с $T = 126.85\text{ °C}$. При медленном нагревании аморфной пленки Ge-Sb-Te область кристаллизации оказывается размытой в широком температурном интервале от 123 °C до 140 °C , при этом пленка оказывается напряженной, сильно текстурированной и характеризуется усредненными величинами постоянных решетки. С ростом температуры от 123 °C до 190 °C параметр ГЦК структуры a_0 меняет свое значение от $\cong 6.0520\text{ \AA}$ до $\cong 6.0035\text{ \AA}$, параметры тригональной структуры меняются от $a_0 \cong 4.2660\text{ \AA}$ и $c_0 \cong 23.4719\text{ \AA}$ до $a_0 \cong 4.2239\text{ \AA}$ и $c_0 \cong 23.3497\text{ \AA}$, что свидетельствует о структурном сжатии кристаллической решетки и ГЦК, и тригональной фаз.

При $T \geq 180\text{ °C}$ начинается переход фазы GST-225 из кубической в тригональную фазу.

Изучение морфологии липидных везикул вблизи температуры точки фазового перехода

*А. А. Павлова¹, М. И. Рулев^{2, 3}, А. И. Иваньков^{2, 3, 4}, А. В. Рогачев^{2, 3}, В. В. Ской^{2, 5},
Д. В. Соловьев^{2, 3, 6}, В. В. Чупин³, В. И. Горделий^{7, 8}, А. И. Куклин^{2, 3}*

¹ Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Московский физико-технический институт, Москва, Россия

⁴ Институт проблем безопасности АЭС НАН Украины, Киев, Украина

⁵ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁶ Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина

⁷ Institute of Complex Systems (ICS-6), Jülich, Germany

⁸ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–
Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS, Grenoble, France

Биологическая клеточная мембрана включает в себя целый ряд липидов и мембранных белков. В связи с этим, липидные мембраны являются хорошей моделью для биофизических исследований, связанных с процессами, происходящими в клеточной мембране. В связи с этим, исследование модельных липидных мембран вблизи температуры их основного фазового перехода имеет существенное значение как для понимания теоретических аспектов физики клеточной мембраны [1], так и для последующих биологических исследований [2].

В настоящей работе производилось изучение однослойных везикул (ULV) липида DMPC, которые были получены путем экструдирования через трековые поликарбонатные мембраны с диаметром пор 300 Å. Во время фазового перехода, с повышением температуры внутренний радиус и поверхность везикулы увеличиваются в связи с изменением гидратации гидрофобных липидных голов и уменьшением толщины липидной мембраны [3]. С помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) мы смогли более детально рассмотреть процесс изменения внутреннего радиуса везикулы и толщины липидного бислоя в зависимости от температуры вблизи точки основного фазового перехода. Измерения проводились на установке BM29 (ESRF, Гренобль, Франция). Полученные данные сравнивались с результатами, полученными методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Представлен сравнительный анализ методов, их преимущества и недостатки.

1. V.I. Gordeliy, V. Cherezov, J. Teixeira. Strength of thermal undulations of phospholipid membranes. *Physical Review E* 72.6 (2005).
2. Д. П. Харакоз. О возможной физиологической роли фазового перехода «жидкое-твердое» в биологических мембранах. *Успехи биологической химии*, 41(2) (2001).
3. D.V. Soloviov, Y. Zabashta, L. Bulavin. Changes in the Area per Lipid Molecule by P–V–T and SANS Investigations. *Macromol. Symp.*, 335, 58–61 (2014).

Развитие методов времяразрешающей дифрактометрии для контроля структурных изменений в диэлектрических кристаллах при воздействии постоянным внешним электрическим полем

*А. А. Петренко^{1, 2}, А. Г. Куликов^{1, 2}, Н. В. Марченков^{1, 2}, Ю. В. Писаревский^{1, 2},
А. Е. Благов^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2}*

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Использование времяразрешающих методик имеет важное значение для изучения динамики быстропротекающих процессов, происходящих в кристаллических образцах, в частности, исследования дефектной структуры и свойств материалов, подвергающихся различного рода внешним воздействиям. Подобные исследования дают понимание процесса переноса заряда в кристаллах с ионной проводимостью, приводящего к образованию новых двумерных приповерхностных структур и новых фаз во внешнем электрическом поле [1]. Особый интерес представляет развитие времяразрешающих рентгенодифракционных методик на основе лабораторных источников излучения благодаря их доступности.

В данной работе был впервые реализован метод времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии с использованием быстродействующего временного многоканального анализатора на лабораторном рентгеновском источнике ($\lambda[\text{MoK}\alpha_1] = 0,70932 \text{ \AA}$) [2]. Предложенный метод позволяет изучать обратимые процессы, протекающие в диэлектрических кристаллах под влиянием внешнего воздействия постоянным электрическим полем с милли- и даже микросекундным временным разрешением. На основе данного метода была реализована методика картирования обратного пространства с временным разрешением, позволяющая разделять вклад деформации по направлениям q_x и q_z обратного пространства в процессе эксперимента [3].

С использованием метода, описанного в [2], проведены исследования динамики изменения параметров кривой дифракционного отражения (КДО) при воздействии внешнего электрического поля напряженностью 1 кВ/мм на кристаллы бифталата калия (БФК) и бифталата рубидия (БФР) с временным разрешением до 10 мс. Измерялись КДО рефлексов 400, 070 и 004 данных кристаллов при обеих полярностях электрического поля, приложенного вдоль направления [001]. Быстрый сдвиг КДО связан с пьезоэффектом и проявляется для обоих типов кристаллов. Кроме того, в кристаллах БФК обнаружены более медленные по кинетике протекания эффекты, вызванные зарядопереносом, предположительно, за счет легких и мобильных ионов калия и приводящие к релаксационному изменению параметра решетки и интегральной интенсивности дифракционных пиков.

1. N.V. Marchenkov et al. // Rev. Sci. Instrum., 89, 095105 (2018).

2. Н. В. Марченков и др. // УФН, 189(2) (2019) DOI: 10.3367/UFNr.2018.06038348.

3. А. Г. Куликов и др. // Письма в ЖЭТФ, 107(10), 679–683 (2018).

Развитие методов QEXAFS с использованием рентгеновского адаптивного изгибного пьезоактуатора

*А. И. Проценко^{1,2}, А. Е. Благов^{1,2}, А. В. Таргонский^{1,2}, Я. А. Элиович^{1,2},
А. В. Рогачев¹, С. Н. Якунин¹, М. В. Ковальчук^{1,2}*

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

На синхротронной станции «Ленгмюр» ККСНИ НИЦ «Курчатовский институт» реализована однокристалльная схема для быстрого управления энергией рентгеновского пучка с помощью адаптивного изгибного рентгеноакустического элемента [1].

Для управления параметрами излучения и записи спектра поглощения использовалась система возбуждения и контроля ультразвуковых колебаний, а регистрация рентгеновского пучка, прошедшего через образец, дифрагированного рентгенооптическим изгибным элементом и ограниченного щелями осуществлялась с помощью сцинтилляционного детектора, подключенного к многоканальному анализатору. Рентгеноакустический элемент возбуждался за счет обратного пьезоэффекта путем подачи переменного синусоидального электрического сигнала амплитудой 90 В на первой резонансной гармонике $f_{\text{рез}} = 239$ Гц. В процессе экспериментов регистрировалась интенсивность пучка в зависимости от фазы управляющего сигнала, которая затем пересчитывалась в спектр поглощения.

Установлено, что положения края поглощения и основных осцилляций XANES-спектра хорошо совпадают. Достигнутый диапазон энергетического сканирования составил 13.25–13.65 кэВ (400 эВ). Максимальное временное разрешение, которое может быть достигнуто при использовании рентгеноакустического метода составляет 2.1 мс, а время необходимое для записи спектра, качество которого достаточно для последующего анализа, в проведенном эксперименте, составило около 30 секунд и может быть уменьшено за счет использования детектора с высоким динамическим диапазоном и скоростью счета, а также оптимизации рентгенооптической схемы измерений.

Разработанная схема перспективна для реализации методов QEXAFS при исследовании кинетики химических реакций, например, циклической реакции Белоусова-Жаботинского [2], а также деформационных процессов в твердых телах в условиях внешних воздействий.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 18-32-20108 мол_а_вед, а также гранта МК-2451.2018.2.

1. А. Е. Благов, А. С. Быков и др. ПТЭ, 2016, № 5, с. 109.

2. M. Hagelstein, T. Liu et al. // J. of Physics: Conference Series 430 (2013) 012123.

**Анодное окисление монокристаллов алюминия:
in situ исследование кинетики упорядочения пористой структуры**

И. В. Росляков¹, А. П. Леонтьев¹, А. А. Елисеев¹, А. П. Чумаков²,
К. С. Напольский¹

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Структура пористых пленок анодного оксида алюминия (АОА) представляет собой массив цилиндрических каналов с гексагональной упаковкой, направленных перпендикулярно плоскости образца. Ранее нами была показана существенная разница в плотности тока при анодном окислении высокосимметричных граней монокристаллов Al, а также значимые различия в упорядоченности структуры АОА формируемого на их поверхности [1].

Данная работа посвящена *in situ* исследованию кинетики упорядочения структуры АОА в процессе анодирования монокристаллов Al с высокосимметричной кристаллографической ориентацией (100), (110) и (111) в 0.3 М растворе серной кислоты при напряжении 25 В. Эксперименты по *in situ* малоугловой рентгеновской дифракции (МУРД) выполнены на станции ID10 в Европейском центре синхротронного излучения (ESRF) с использованием рентгеновского излучения с длиной волны 0.56 Å в геометрии на пропускание.

По данным *in situ* МУРД, средний размер доменов пористой структуры на поверхности Al(111) линейно возрастает с плотностью заряда анодирования. В случае Al(100) и Al(110) наблюдается более быстрая кинетика упорядочения на начальном этапе с последующим выходом на насыщение. Статистический анализ РЭМ изображений АОА показывает преобладание высокоугловых границ между соседними доменами в данном случае. Напротив, для Al(111) характерно объединение доменов через малоугловые границы, что при длительном окислении приводит к формированию монодоменных структур. Подобное поведение является следствием симметрии Al подложек: в случае Al(111) симметрия структуры АОА совпадает с симметрией расположения атомов алюминия в плоскости монокристалла, что способствует появлению крупных упорядоченных областей; для Al(100) наличие оси симметрии 4-го порядка приводит к большому количеству доменов малой площади.

Минимальная извилистость каналов наблюдается в структуре АОА на поверхности Al(100). В данном случае кристаллографические плоскости с высокой плотностью упаковки атомов расположены вдоль направлению роста каналов. По данным *in situ* МУРД, для подложек Al(100) и Al(110) уменьшение извилистости каналов на начальной стадии анодирования происходит быстрее, чем в случае Al(111).

1. I.V. Roslyakov, D.S. Koshkodaev et al., J. Phys. Chem. C. 121, 27511 (2017).

Диагностика структуры коллагена средневековых пергаменов методом малоуглового рентгеновского рассеяния на синхротронном источнике

Е. А. Созонтов, Г. С. Петерс

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Аналитическая диагностика предметов искусства и культурных ценностей становится все более востребованной в современном междисциплинарном исследовании [1, 2]. Задача работы состояла в развитии неразрушающего метода диагностики степени деградации коллагеновой структуры средневековых пергаменов. Объектами исследования были пробы средневековых пергаменных рукописей из коллекции Государственного исторического музея. Эксперименты по малоугловому рассеянию рентгеновских лучей проводились на станции ДИКСИ специализированного Курчатовского источника синхротронного излучения.

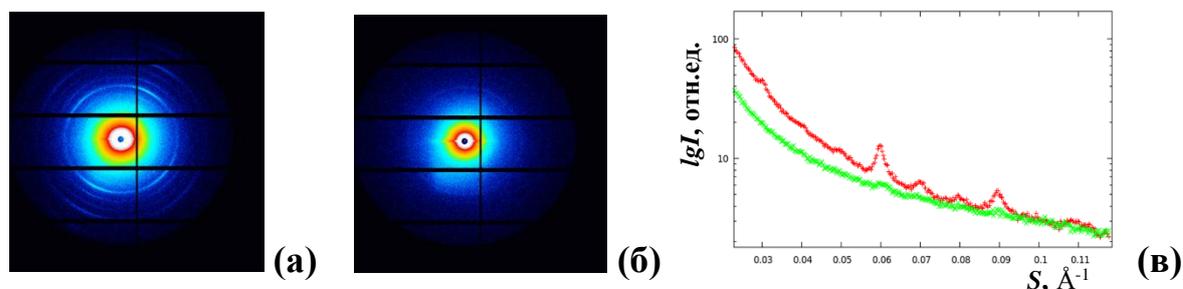


Рис. Азимутальные (а) – Проба 1; (б) – Проба 2 и радиальные (в) – (+ Проба 1; × Проба 2) распределения интенсивности малоуглового рентгеновского рассеяния

В качестве примера на рисунке приведены данные малоуглового эксперимента для двух проб пергамена рукописей из коллекции ГИМ: Проба 1. Византия, 1063 г.; Проба 2. Болгария, XIII в. Отсутствие дифракционных пиков для Пробы 2 на рис. в и широкое диффузное гало на рис. б позволяют сделать заключение о процессе желатинизации коллагена пергамена Пробы 2. Такие интегральные оценки состояния структуры коллагена средневекового пергамена, на наш взгляд, являются важными характеристиками для мониторинга состояния структуры пергамена в целом, а также для совершенствования процессов консервации и хранения пергаменных рукописей.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 17-29-04476 офи-м) и частичной финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт». Образцы для исследований предоставлены Государственным историческим музеем в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между НИЦ «Курчатовский институт» и ГИМ.

1. Ковальчук М. В., Яцишина Е. Б., Благов А. Е. и др. // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 5. С. 681. DOI: 10.7868/S002347611605009X.
2. Bertrand L., Dillmann P. and Reiche I. // J. Anal. At. Spectrometry. 2015. V. 30. P. 540.

Устройство монохроматора экспериментальной станции «РФА-СИ»

И. И. Строков¹, М. А. Уфимцев^{1,2}, М. А. Холопов¹

¹ *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

В данной работе описана модификация монохроматора для экспериментальной станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3 Центра коллективного пользования «СЦСТИ» ИЯФ СО РАН, позволяющая получить шаг по углу порядка: $\Delta\theta = 3 * 10^{-5}$ для проведения одновременных исследований по картированию РФА и микро-XAFS.

В рамках этой работы была разработана конструкция и произведена сборка монохроматора, написано программное обеспечение, обеспечивающее необходимые режимы работы. Проведена предварительная проверка углового разрешения узла монохроматизации вне станции. Так же проведена проверка работы монохроматора непосредственно на экспериментальной станции.

**Адаптивные рентгенооптические элементы
с сочетанием продольных и поперечных акустических волн
килогерцового и мегагерцового диапазона частот**

*А. В. Таргонский^{1, 2}, А. Е. Благов^{1, 2}, А. Р. Мкртчян³, В. Р. Кочарян³,
А. Г. Куликов^{1, 2}, А. Е. Мовсисян³, Т. Р. Мурадян³, Ю. В. Писаревский^{1, 2},
Я. А. Элиович^{1, 2}, В. И. Аккуратов^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2}*

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

³ *Институт прикладных проблем физики НАН РА, Ереван, Армения*

В настоящей работе приводятся результаты исследования поведения кристаллической решетки в условиях возбуждения продольных и поперечных акустических колебаний. В основе исследований лежат работы Российских и Армянских ученых, в которых показаны возможности эффективного управления параметрами излучения с помощью акустических волн кило- и мегагерцового диапазонов [1, 2].

В работе исследованы эффекты перераспределения интенсивностей между дифрагированным и проходящим пучками излучения в условиях возбуждения акустических резонансных колебаний по толщине в кристаллах кварца. Установлено, что эффект увеличения интенсивности дифрагированного пучка практически линейно зависит от амплитуды ультразвука (полуширина КДО при этом не меняется) и наблюдается для всех исследованных рефлексов как в геометрии Лауэ, так и Брэгга.

Впервые установлены временные характеристики эффекта при возбуждении и релаксации ультразвуковых колебаний: процесс нарастания интенсивности занимает порядка 250 микросекунд, затем наблюдается ее осцилляция в течение примерно 1 миллисекунды, а процесс полной релаксации занимает порядка 1.5 миллисекунд.

Рассмотрены возможности создания элементов, сочетающих толщинные и продольные колебания, предложено несколько схем реализации. Впервые исследован эффект перераспределения интенсивности в кристаллах бифталатов калия и рубидия, являющихся крайне перспективными материалами для создания двухчастотного элемента.

В докладе будут обсуждены перспективы применения таких элементов на источниках синхротронного излучения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов ГКН МОН РА и РФФИ (РФ) в рамках совместной научной программы 18RF-142 и 18-52-05024 Арм_а соответственно.

1. А. Е. Благов, М. В. Ковальчук и др. Письма в ЖЭТФ, т. 128, 5(11) (2005). С. 893.
2. А. Р. Мкртчян, М. А. Навасардян, В. К. Мирзоян. Письма в ЖТФ, 8, 677 (1982).

Многоволновая дифракция синхротронного рентгеновского излучения при обратном отражении от изогнутых кристаллов

Т. Чен

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

Представлена теория обратного дифракционного отражения синхротронного рентгеновского излучения от изогнутых кристаллов с учетом многоволновых эффектов. Рассмотрены случаи слабого и сильного изгибов кристалла. Показано, что многоволновая обратная дифракция рентгеновского излучения от изогнутых кристаллов чувствительна к степени изгиба кристаллов, что позволяет использовать обратное рассеяние для определения радиуса изгиба кристалла. Проведен анализ некоторых динамических эффектов, возникающих при обратном дифракционном отражении синхротронного рентгеновского излучения, таких как фокусировка и пространственная концентрация синхротронного излучения и управление этим излучением. Обратное дифракционное отражение обладает рядом особенностей (широкая область дифракционного отражения, минимальные aberrации и др.), позволяющие использовать его для создания светосильных пучков. Детально рассмотрена трехволновая обратная дифракция синхротронного излучения.

Определение структуры ГЦК-металлических наночастиц по XANES-спектрам с использованием алгоритмов машинного обучения

А. Л. Шагинян, В. В. Прядченко, В. Н. Раздоров, Л. А. Авакян

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В последние десятилетия уникальные свойства металлических наночастиц, такие как их высокая каталитическая активность [1], антисептические и терапевтические свойства [2], оптические свойства [3, 4], а также иные применения в биологии и медицине [5, 6], привлекают внимание исследователей всего мира. На сегодняшний день существует множество экспериментальных методов диагностики структурных характеристик таких материалов, основанных на взаимодействии различных видов излучения с веществом. Полноценный структурный анализ, как правило, включает в себя применение нескольких методов экспериментальной диагностики с последующей расшифровкой данных, основанной на имеющихся теоретических представлениях о процессах взаимодействия зондирующего излучения с веществом. Такой подход, как правило, представляет собой оптимизационную задачу, в рамках которой наборы экспериментальных данных подгоняются теоретическими функциями, рассчитываемыми из первых принципов.

Альтернативой данному подходу является подход, основанный на построении систем *машинного обучения* [7]. Принципиальным отличием подобных систем от классических является то, что в систему не закладываются явно знания о методиках расшифровки данных, однако она способна обучаться извлекать одни данные из других. В настоящей работе мы проводим анализ методом «обучения с учителем» с использованием многослойной и сверточной нейронных сетей для определения структурных характеристик небольших ($D < 40$ нм) металлических наночастиц на основании XANES спектров [8]. К таким структурным характеристикам в первую очередь относятся координационные числа первых четырех координационных сфер. Как известно, для обучения требуется большая выборка данных, получить экспериментально которую, как правило, не представляется возможным. В работе проблема больших данных решена путем моделирования набора разнообразных кластеров с помощью Python-библиотеки ASE и теоретического расчета спектров XANES.

Дальнейшее развитие работы предполагается в направлении исследования структурных характеристик биметаллических наночастиц, тестировании модели на экспериментальных данных, а также построении системы автоматической оценки параметров структуры наноматериала с применением комбинации различных экспериментальных данных.

Данное исследование поддержано грантом «Многомасштабная диагностика структуры нанокompозитных материалов, содержащих моно- и биметаллические наночастицы, с использованием алгоритмов машинного обучения» № 18-71-00092 Российского научного фонда.

1. Guterman V.E., Alekseenko A.A., Volochaev V.A., Tabachkova N.Y. Synthesis of nanostructured Pt/C electrocatalysts and effects of ambient atmosphere composition and an intermediate support on their microstructure *Inorg. Mater.*, 2016, 52, 23–28.
2. Manukyan A.S., Avakyan L.A., Elsukova A.E., Zubavichus Y.V., Sulyanov S.N., Mirzakhanyan A.A., Kolpacheva N.A., Spasova M., Kocharian A.N., Farle M., Bugaev L.A., Sharoyan E.G. Formation of nickel nanoparticles and magnetic matrix in nickel phthalocyanine by doping with potassium *Mater. Chem. Phys.*, 2018, 214, 564–571.
3. Heinz M., Srabionyan V.V., Bugaev A.L., Pryadchenko V.V., Ishenko E.V., Avakyan L.A., Zubavichus Y.V., Ihlemann J., Meinertz J., Pippel E., Dubiel M., Bugaev L.A. Formation of silver nanoparticles in silicate glass using excimer laser radiation: Structural characterization by HRTEM, XRD, EXAFS and optical absorption spectra *J. Alloys Compd.*, 2016, 681, 307–315.
4. Avakyan L.A., Heinz M., Skidanenko A.V., Yablunovskiy K.A., Ihlemann J., Meinertz J., Patzig C., Dubiel M., Bugaev L.A. Insight on agglomerates of gold nanoparticles in glass based on surface plasmon resonance spectrum: Study by multi-spheres T-matrix method *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, 30, 045901–045909.
5. Pankhurst Q.A., Connolly J., Jones S.K., Dobson J. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2003, 36, R167.
6. Qian X.-M., Nie S.M. Single-molecule and single-nanoparticle SERS: from fundamental mechanisms to biomedical applications *Chem. Soc. Rev.*, 2008, 37, 912–920.
7. J. Timoshenko, D. Lu, Y. Lin, and A.I. Frenkel, *J. Phys. Chem. Lett.* 8, 5091 (2017).
8. E. Stern, in *X-Ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES*, edited by D. Koningsberger and R. Prins (John Wiley and Sons, New York, NY, 1988), Chap. 1, p. 3.

Развитие рентгеноакустических методов исследования дефектной структуры кристаллов

*Я. А. Элиович^{1, 2}, А. В. Таргонский^{1, 2}, А. Е. Благов^{1, 2}, Ю. В. Писаревский^{1, 2},
В. И. Аккуратов^{1, 2}, А. И. Проценко^{1, 2}, А. Г. Куликов^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2}*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Одной из актуальных современных научных задач является разработка новых методов управления параметрами рентгеновского излучения, в том числе сканирования условий дифракции, которые позволят осуществлять управление параметрами пучка за время, существенно меньшее требуемого с использованием традиционных подходов и систем. Одним из способов обойти данное ограничение является использование немеханических адаптивных элементов рентгеновской оптики – рентгеноакустических резонаторов продольных колебаний или биморфных пьезоактуаторов [1].

В данной работе предложен новый метод, основанный на таких элементах, который позволяет проводить быструю и прецизионную перестройку параметров рентгенодифракционных экспериментов, варьировать угловое положение рентгеновского пучка и управлять его длиной волны. Уникальной особенностью метода является возможность проведения экспериментов не только в лабораторных условиях, но и на синхротронных станциях.

Метод успешно применен для исследования процессов, возникающих в кристаллах под действием как статической, так и динамической нагрузки. С его помощью проведены исследования кристалла кремния, подвергнутого квазистатической механической нагрузке [2]. Также проведены исследования эволюции дефектной структуры монокристаллов фторида лития в условиях динамической ультразвуковой нагрузки в широком диапазоне значений амплитуд [3]. Показано, что дифракционная картина (форма и полуширина КДО) под действием ультразвука может существенно отличаться от исходной, причем предложенный метод позволяет проводить мониторинг ее изменения с временным разрешением до 10 мкс, недоступным при использовании механических гониометрических систем. Исследования эволюции дефектной структуры с помощью нового метода показали его существенное (как минимум 3 порядка на лабораторном источнике) превосходство по быстродействию над существующими методами.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 18-32-20108 мол_а_вед и гранта МК-2451.2018.2.

1. Благов А. Е., Быков А. С. и др. ПТЭ. 2016. № 5. С. 109.
2. Я. А. Элиович, В. И. Аккуратов и др. Кристаллография, 2018, т. 63, № 5, С. 708.
3. Благов А. Е., Писаревский Ю. В. и др. // ФТТ. 2017. Т. 59. № 5. С. 947.

***In situ* синхротронное исследование слоистых двойных гидроксидов, интеркалированных анионами хлора и сульфата**

М. Х. Юзвюк¹, И. А. Зобкало¹, А.С. Bouali², Г. Довженко^{1, 2}, М. В. Сердечнова², D.C.F. Wieland¹, К.А. Yasakau³, М. Л. Желудкевич²

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Helmholtz-Zentrum, Geesthacht, Germany

³ CICECO – Aveiro Institute of Materials, Aveiro, Portugal

В связи с поиском новых нетоксичных защитных материалов в области коррозионной защиты металлов проводились исследования того, каким образом микро- и нанорезервуары могут быть использованы в качестве контейнеров для ингибиторов коррозии с их последующим контролируемым выделением. Одними из таких наноконтейнеров являются слоистые двойные гидроксиды (СДГ) – соединения с анионообменной способностью, в общем случае описываемые формулой $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^y]_{x/y} \cdot zH_2O$, где $M^{II,III}$ и A^y – металлические и межслойные ионы. После интеркаляции в них ингибиторов коррозии СДГ могут использоваться в качестве высокоэффективных антикоррозионных материалов [1].

Данная работа посвящена исследованию кинетики интеркаляции анионов Cl^- и SO_4^{2-} в СДГ, выращенном на цинковой подложке. В результате *in situ* синхротронного эксперимента получены наборы данных для двух процессов анионного обмена: анион NO_3^- в родительском СДГ замещался на ионы Cl^- и SO_4^{2-} . Анализ кристаллической структуры показывает, что СДГ- NO_3 и СДГ- Cl описываются пространственной группой $R-3m$, параметры ячейки соответственно $a = 3.0771(2) \text{ \AA}$, $c = 26.862(9) \text{ \AA}$ и $a = 3.081(2) \text{ \AA}$, $c = 23.359(5) \text{ \AA}$. Структура СДГ- SO_4 описывается другой пространственной группой – $P-3$ с параметрами ячейки $a = 5.3338(4) \text{ \AA}$, $b = 11.109(2) \text{ \AA}$.

В обоих случаях в ходе интеркаляции родительская фаза СДГ- NO_3 полностью исчезает, а образование новой кристаллической фазы происходит с возникновением промежуточной. При обмене $NO_3 \rightarrow Cl$ промежуточная фаза исчезает к концу реакции, тогда как для $NO_3 \rightarrow SO_4$ полного исчезновения промежуточной фазы в конце анионного обмена не наблюдается.

Анализ анионного обмена, проведенный по модели Авраами-Ерофеева [2], показывает, что для замещения $NO_3 \rightarrow Cl$ уход NO_3^- и появление промежуточной фазы с Cl^- является двумерным процессом, контролируемым фазовой границей. Дальнейшие процессы исчезновения промежуточной и появления конечной фаз являются одномерными диффузионно-контролируемыми реакциями. Аналогичным образом описывается анионный обмен $NO_3 \rightarrow SO_4$.

1. M. Serdechnova et al., J. Solid State Chem., 233 (2016).
2. G.R. Williams et al., Struct Bond 119 (2006).

**Carbon nanostructures as Nafion membrane modifiers:
current achievements and challenges**

*J.R. Ilidio, K.N. Semenov, N.E. Podolsky,
V.N. Postnov, N.A. Melnikova, I.V. Murin*

Institute of Chemistry – Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

In the last years, the fuel cell (FC) technology emerged as a substitute for the energy conversion devices, holding the promise of a new era of clean and renewable technology for supply the world's rising energy demand [1]. Thus, improvements on FC components are needed for overstep the current energy conversion technologies. Researches have been focusing on improvement of the proton exchange membrane, also called ionomer, once it plays the most important role on the cell. Increasing attention has been paid to the development of composite polymer membranes for fuel cells. The interest in Nafion-based composite materials is primarily due to the need to improve performance compared with commercially available ionomers such as pure Nafion. A new field of research is the development of Nafion composites doped with carbon nanostructures as membranes modifiers [2]. In the present study the proton conductivity of Nafion-composite film samples containing fullerenes (C_{60} , C_{70}) and fullerlenols ($C_{60}(OH)_n$, $n = 22-24$, $C_{70}(OH)_n$, $n = 12$) was investigated. Figure shows that all composite films demonstrate increased proton conductivity in comparison with non-modified Nafion films, especially at low relative humidity, below 60%.

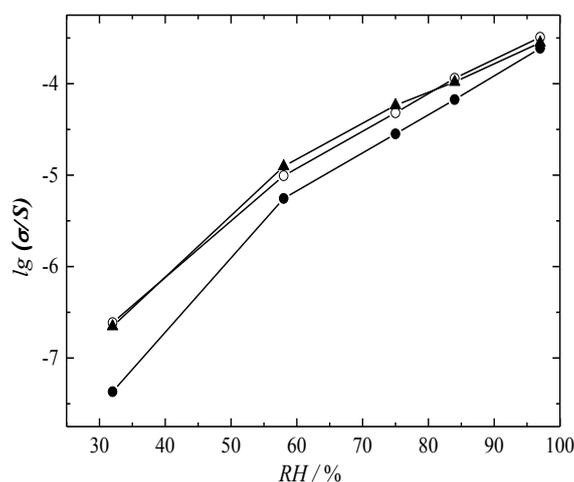


Fig. Dependence of proton conductivity of (●) Nafion, (○) Nafion – 1% $C_{60}(OH)_{22-24}$, and (▲) Nafion – 1% $C_{70}(OH)_{12}$ composites on the relative humidity of air at 298 K [2]

1. O.Z. Sharaf, M.F. Orhan, J. Renew. Sust. Energ. Rev. 32, 44 (2014).
2. K.N. Semenov *et al.*, J. Prog. Solid State Chem. 16 (2016).
3. K.N. Semenov *et al.*, J. Prog. Solid State Chem. 47–48, 18 (2017).

Differential thermal analysis of BaFe_{12-x}Ga_xO₁₉

S.H. Jabarov^{1, 2}, A.I. Mammadov¹, A.V. Trukhanov³

¹ *Institute of Physics, NAS of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan*

² *Department of Physics and Technology, Azerbaijan State Pedagogical University, Baku, Azerbaijan*

³ *Scientific Practical Materials Research Centre, NAS of Belarus, Minsk, Belarus*

Barium hexaferrites and their solid solutions can show stable ferroic properties at high-temperatures. Therefore, studying thermodynamic parameters for technical applications of these materials is very important. Although ferroelectric and ferromagnetic properties of BaFe_{12-x}Ga_xO₁₉ ($x = 0.1-1.2$) solid solutions have been thoroughly investigated, the thermal properties of these materials have not been sufficiently studied. Crystal structures and thermic parameters of BaFe_{11.9}Ga_{0.1}O₁₉ and BaFe_{11.7}Ga_{0.3}O₁₉ solid solutions have been studied in this work. Various types of thermal processes have been kinetically analyzed in regard to temperature in this work (DSC Scanning Kinetics, DSC Isothermal Kinetics and TGA Decomposition Kinetics).

The X-ray diffraction measurement has been performed by using Bruker D8 Advance powder diffractometer with the following parameters: 40 kV, 40 mA, Cu $K\alpha$ radiation ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$). Explorations on DTA have been implemented by the “Perkin Elmer” STA 6000 device. In this device, the operating range is 30–950 °C, thermal processing velocity 5 °C/min, PolyScience analyzer and “digital temperature controller” cooling system. Kinetic parameters have been appointed by the “Pyris Manager” software.

At the standard conditions, the X ray diffraction spectra corresponded to the hexagonal crystal structure with P6₃/mmc symmetry. The unit cell parameters at normal conditions are: $a = 5.878(9) \text{ \AA}$, $c = 23.154(3) \text{ \AA}$ (for BaFe_{11.9}Ga_{0.1}O₁₉) and $a = 5.888(1) \text{ \AA}$, $c = 23:205(1) \text{ \AA}$ (for BaFe_{11.7}Ga_{0.3}O₁₉). As the gallium ion content increased, the unit cell parameters and volume decreased. This behavior is explained by the substitution of Ga³⁺ ions with lower radius ($r_{\text{Ga}} = 0.62 \text{ \AA}$) for Fe³⁺ ions with larger radius ($r_{\text{Fe}} = 0.64 \text{ \AA}$).

Thermo physical properties of BaFe_{11.9}Ga_{0.1}O₁₉ and BaFe_{11.7}Ga_{0.3}O₁₉ solid solutions have been studied by thermogravimetric and differential scanning calorimetric methods. It is determined that these compounds have characteristic transitions at 72 °C and 85 °C temperatures. From the spectra of the TG and DTG loss of mass and energy are determined in the temperature range of 30–950 °C. At the temperature of $T = 120 \text{ °C}$, the endoeffects are chemically absorbed water on the active surface of the compound and are a decomposition of the hydroxide group. The endoeffect, at which its central peak reaches $T = 80 \text{ °C}$, is associated with an OH group that has been chemically absorbed, observed revised effects with a difference $T = 35 \text{ °C}$ for relative decomposition at high-temperature.

Thermodynamic properties of the polyhydroxylated fullerene – $C_{70}(OH)_{12}$

N.E. Podolsky¹, M.I. Lelet², N.R. Iamalova¹

¹ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

² Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia

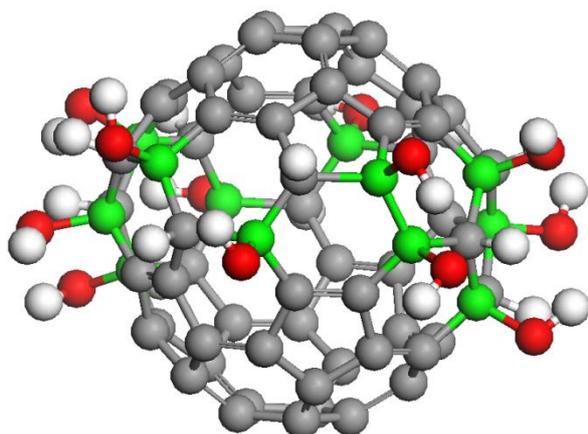


Fig. 1. Structure of $C_{70}(OH)_{12}$ polyhydroxylated fullerene

$C_{70}(OH)_{12}$ derivative (Fig. 1) in the temperature range $T = 5$ to 326 K were obtained (Fig. 2), as well as standard thermodynamic functions (molar third law entropy, standard molar entropy of formation) within a range of $T = 5$ K to 326 K were calculated. The results of complex thermal analysis in the temperature range $T = 303.62$ to 1274.95 K show that the mass loss (in the temperature range 298–840 K) is equal to 19.54% and this value corresponds destruction of 12 hydroxyl groups.

Based on quantum chemical calculations NMR spectra and temperature dependence of heat capacity were predicted for $C_{70}(OH)_{12}$ (Fig. 1).

This work was supported by grant of Russian Foundation for Basic Research № 18-08-00143.

1. K.N. Semenov, N.A. Charykov et al., J. Chem. Eng. Data., 56, 2 (2011).
2. K.N. Semenov, N.A. Charykov et al., Progress in Solid State Chemistry, 44, 2 (2016).

Water-soluble derivatives of fullerenes have potential for application in various fields of science and industry, for example as modifiers of natural and synthetic polymers, nanoionic materials, cements, lubricants and paints, as well as in biomedicine [1]. However, the number of papers devoted to the thermodynamic study of fullerenes and fullerene derivatives is scares.

Using precision adiabatic vacuum calorimetry (“AK-9.02/BCT-21”-type calorimeter, TERMAX), the isobaric heat capacity data for

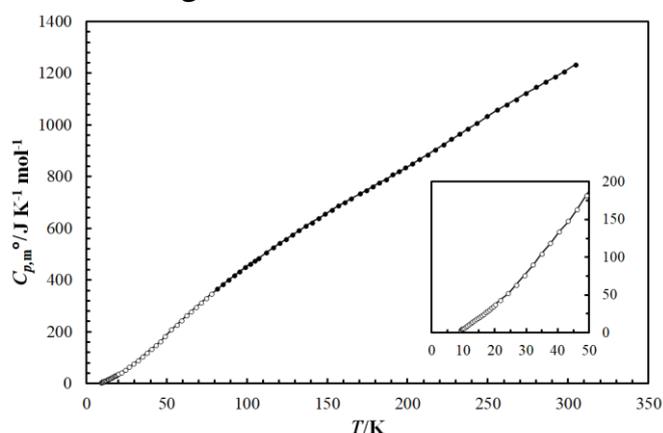


Fig. 2. Temperature dependence of isobaric heat capacity of the $C_{70}(OH)_{12}$ derivative in the temperature range from $T = 5$ K to 326 K

Thermodynamic and quantum chemical investigation of the monocarboxylated fullerene C₆₀CH(COOH)

O.S. Shemchuk, N.E. Podolsky, K.N. Semenov

Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

In recent years, fullerene derivatives have attracted the attention of researchers in the field of nanobiomedicine due to a wide spectrum of biological activity that allows them to be considered as promising compounds for the medicine development [1–3]. A significant amount of experimental data on the biological effect of carboxylated derivatives of fullerenes has been obtained, in particular, it has been shown that these adducts are effective scavengers of free radicals and reactive oxygen species. The present work is devoted to investigation of thermodynamic properties of monocarboxylated derivative C₆₀CH(COOH). The thermodynamic study of C₆₀CH(COOH) derivative and the calculation of the standard thermal thermodynamic functions (heat capacity C_p , entropy S_m° , enthalpy $[H_m^\circ(T) - H_m^\circ(0)]$, Gibbs energy $[G_m^\circ(T) - G_m^\circ(0)]$ at $p = 0.1$ MPa) was carried out using the adiabatic vacuum calorimetry method in the temperature diapason from $T = 5$ to 328 K. In addition, the thermal properties of the C₆₀CH(COOH) adduct have been studied using a complex thermal analysis. Calculation of the heat capacity for monocarboxylated C₆₀CH(COOH) fullerene in harmonic approximation was first carried out over a wide temperature range using the DFT method. Figure presents the temperature dependence of the C₆₀CH(COOH) heat capacity in the temperature range $T = 5$ to 328 K. It can be seen that the obtained results are well-behaved, moreover we have not observed phase transitions or anomalies. The calculated values of heat capacity at various temperatures are in a good agreement with experimental ones.

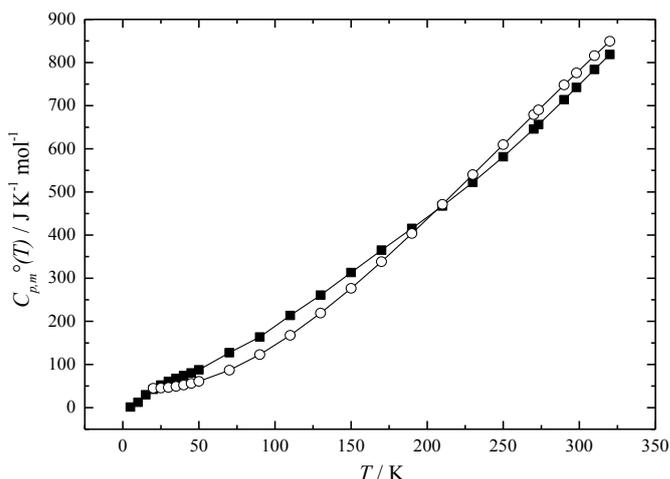


Fig. Temperature dependence of heat capacity ($C_{p,m}^\circ / \text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$): ■ – experimental data; ○ – DFT-calculated data for C₆₀CHCOOH

energy $[G_m^\circ(T) - G_m^\circ(0)]$ at $p = 0.1$ MPa) was carried out using the adiabatic vacuum calorimetry method in the temperature diapason from $T = 5$ to 328 K. In addition, the thermal properties of the C₆₀CH(COOH) adduct have been studied using a complex thermal analysis. Calculation of the heat capacity for monocarboxylated C₆₀CH(COOH) fullerene in harmonic approximation was first carried out over

a wide temperature range using the DFT method. Figure presents the temperature dependence of the C₆₀CH(COOH) heat capacity in the temperature range $T = 5$ to 328 K. It can be seen that the obtained results are well-behaved, moreover we have not observed phase transitions or anomalies. The calculated values of heat capacity at various temperatures are in a good agreement with experimental ones.

1. T. Da Ros, M. Prato, Chem. Commun., 663, 8 (1999).
2. K.N. Semenov, E.V. Andrusenko et. al., Prog. Solid State Chem., 19, 47–48 (2017).
3. K.N. Semenov, N.A. Charykov et. al., Prog. Solid State Chem., 59, 44 (2016).

Электронное рамановское рассеяние и перспективы его применения для индексирования двустенных углеродных нанотрубок

М. В. Авраменко¹, Д. И. Левшов¹, J.-L. Sauvajol², M. Paillet²

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

² Laboratoire Charles Coulomb, University of Montpellier, Montpellier, France

Электронное рамановское рассеяние, которое прежде наблюдалось в графене [1], а также в металлических [2] и полупроводниковых [3] индивидуальных одностенных углеродных нанотрубках (УНТ) и их небольших пучках [4, 5], впервые было зарегистрировано в индивидуальных двустенных УНТ с различными конфигурациями типов проводимости слоев: М@ПП, ПП@М и М@М, где М – металлическая одностенная УНТ, ПП – полупроводниковая, а символ @ разделяет в записи внутреннюю и внешнюю нанотрубки, соответственно. Образцы были получены при помощи процесса каталитического химического осаждения из газовой фазы и тщательно изучены посредством комбинации [6] таких методов исследования, как дифракция электронов, просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения, рэлеевская и рамановская спектроскопии. В десяти структурно идентифицированных двустенных УНТ был получен и проанализирован сигнал электронного рамановского рассеяния, были выявлены особенности данного явления и некоторые закономерности его наблюдения. Также было показано, что информация о положении пиков электронного рамановского рассеяния может выступать в роли дополнительного критерия для индексирования двустенных УНТ, позволяя минимизировать вероятность ошибок.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-32-00397 мол_а).

1. Yu.S. Ponosov, A.V. Ushakov, S.V. Streltsov, Physical Review B 91, 195434 (2015).
2. H. Farhat, S. Berciaud, M. Kalbac et al., Phys. Rev. Lett. 107, 157401 (2011).
3. X. Chen, B. Zhu, A. Zhang et al., Sci. Rep. 4, 5969 (2014).
4. D. Zhang, J. Yang, E.H. Hasdeo et al., Phys. Rev. B 93, 245428 (2016).
5. D. Zhang, J. Yang, M. Li et al., ACS Nano 10, 10789 (2016).
6. D.I. Levshov, H.N. Tran, M. Paillet et al., Carbon 114, 141 (2017).

Физико-химические свойства водных растворов производного $C_{60}[C(COOH)_2]_3$

С. В. Азеев¹, К. Н. Семенов¹, Н. А. Чарыков²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

Производные фуллерена и, в частности, карбоксилированные производные легких фуллеренов являются перспективными соединениями из-за возможностей их практического применения в биохимии и медицине [1–3]. Например, они могут быть использованы в качестве противоопухолевых, нейропротективных, противовирусных препаратов и могут обладать противомикробной и антиоксидантной активностью. В то же время для реализации биомедицинского потенциала этих соединений важно провести исследование физико-химических свойств и установить взаимосвязь между структурой производных фуллеренов, его свойствами и биологической активностью.

Настоящая работа посвящена физико-химическому исследованию свойств водных растворов карбоксилированного производного фуллерена $C_{60}[C(COOH)_2]_3$ (рис.). В результате проведенных исследований были получены экспериментальные температурные и концентрационные зависимости плотности (ρ), вязкости (η), показателя преломления (n_D) водных растворов. Кроме того, были получены концентрационные зависимости избыточных термодинамических функций, размеров ассоциатов (δ) и электрофоретической подвижности (U_i).

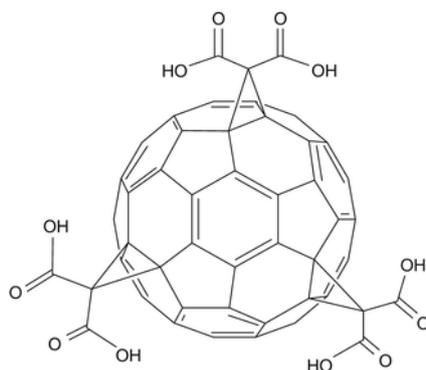


Рис. Структурная формула производного фуллерена $C_{60}[C(COOH)_2]_3$

1. K.N. Semenov, N.A. Charykov, V.N. Postnov, V.V. Sharoyko, I.V. Vorotyntsev, M.M. Galagudza, I.V. Murin, Prog. Solid State Chem. 44 (2016) 59–74.
2. K.N. Semenov, E.V. Andrusenko, N.A. Charykov, E.V. Litasova, G.G. Panova, A.V. Penkova, I.V. Murin, L.B. Piotrovskiy, Prog. Solid State Chem. 47–48 (2017) 19–36.
3. F. Cataldo, T. Da Ros, Springer, 2008.

Структурные фазовые превращения в системе $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$

Д. Ф. Акрамов¹, Н. В. Селезнева¹, Н. В. Баранов^{1, 2}

¹ *Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Известно, что соединения Co_7X_8 ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}$) обладают гексагональной слоистой структурой типа NiAs с пространственной группой $P6_3/mmc$ [1]. При замещении селена серой в системе $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{S}_y)_8$ наблюдается непрерывный ряд твердых растворов. В литературе отсутствует информация о замещении селена теллуrom в системе $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$, а данные о существовании состава Co_7Te_8 носят неоднозначный характер.

Поликристаллические образцы $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ были получены по одностадийной методике твердофазным синтезом в вакуумированных кварцевых ампулах. Аттестация фазового состава и терморентгенография проводилась на дифрактометре Bruker D8 Advance в диапазоне температур от 20–700 °С. Измерение теплового расширения проводилось на dilatометре DL-1500 RHP/DL-1500-H (UCVAC/SINKU) в температурном интервале от 20–550 °С.

В системе $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ замещение селена теллуrom приводит к разупорядочению вакансий в катионной подрешетке. До концентрации теллура $y = 0.2$ замещение приводит к изменению пространственной группы от $P3_121$ к $P-3m1$. При дальнейшем увеличении концентрации теллура $y > 0.2$ соединения кристаллизуются в пространственной группе $P6_3/mmc$.

Измерения теплового расширения выявило аномальное поведение исследуемых образцов, так при $T \sim 450$ °С в богатых теллуrom образцах ($y > 0.5$) происходит резкое увеличение их размеров. При термоциклировании размер образцов не возвращается к исходному значению. Терморентгенография исследуемых соединений показала, что в соединениях с $y \leq 0.5$ при температурах близких к $T \sim 450$ °С наблюдается структурный фазовый переход. В образцах $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ с $y > 0.5$ аномальное поведение КТР вызвано фазовым расслоением: на фазу богатую теллуrom и фазу богатую селеном.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 3.2916.2017/4.6).

1. V.L. Miller et al., Journal of Solid State Chemistry, 178, 1508 (2005).

Исследование структурных фазовых переходов в монокристаллах органоминерального перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

В. Е. Аникеева^{1,2}, К. Н. Болдырев², О. И. Семенова³

¹ *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Москва, Россия*

² *Институт спектроскопии РАН, Москва, Россия*

³ *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*

Металлорганический перовскит $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ благодаря оптимальной ширине запрещенной зоны (1,55 эВ), высокому значению диффузионной длины (175 мкм) и коэффициенту поглощения видимого излучения, равному 105 см^{-1} , в последнее время представляет большой интерес как перспективный материал для фотогальванических устройств. КПД солнечных элементов на основе перовскита к 2017 году достиг 22,1 % [1]. Кроме того, для синтеза соединения $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ не требуется наличие редких элементов, что делает данный материал дешевым в использовании. Для изучения оптических свойств $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ использовались монокристаллы перовскита, состав и структура которых были подтверждены методами РФЭС и рентгеновской дифракцией. В данной работе исследовалась температурная зависимость спектров фотолюминесценции (ФЛ) и спектров пропускания в температурном диапазоне от 5 К до 330 К. Анализ спектров пропускания показывает, что при температуре 161 К происходит резкий сдвиг края поглощения в длинноволновую область спектра. Это свидетельствует о структурном фазовом переходе первого рода из орторомбической фазы (низкие температуры) в тетрагональную (от 160 К до 350 К), что согласуется с литературными данными [2]. Описанный фазовый переход исследован и в спектрах ФЛ. Также наблюдается особенность в спектрах ФЛ и спектрах пропускания при 40 К. Структурные фазовые переходы из орторомбической в тетрагональную фазу (130 К) и из тетрагональной в кубическую фазу (330 К) в $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ подтверждены данными рентгеновской дифракции, полученными в ЦКП «Сибирский Центр Синхротронного и Терагерцового Излучения» (ИЯФ СО РАН).

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ № МК-216.2019.2.

1. W.S. Yang et al., Science 356, 1376 (2017).
2. P.S. Whitfield et al., Sci. Rep. 35685, 6 (2016).

Структура и физические свойства Mg-содержащих Ln_2MoO_6 ($Ln = La, Pr, Nd$) соединений

А. М. Антипин¹, Т. А. Сорокин¹, Н. И. Сорокина¹, О. А. Алексеева¹,
А. Л. Васильев¹, В. И. Воронкова²

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Соединения типа Ln_2MoO_6 , так называемые оксимолибдаты, отличаются химической стойкостью, высокими показателями преломления, интенсивной люминесценцией, однако особый интерес представляют их проводящие свойства. Проводимость беспримесных образцов Ln_2MoO_6 существенно ниже проводимости близких по составу известных кислородных проводников со структурой $La_2Mo_2O_9$ и с флюоритоподобной структурой типа $Nd_5Mo_3O_{16+\delta}$ [1]. Однако, при допировании оксимолибдатов свинцом было обнаружено кардинальное изменение их физических свойств. Ионная проводимость возрастает на два порядка и достигает 10^{-2} См/см при температуре 800 °С, появляется антисегнетоэлектрический фазовый переход, возникает пьезоэлектрический отклик [2].

Настоящая работа посвящена исследованию строения и свойств беспримесных и допированных магнием поли- и монокристаллов Ln_2MoO_6 , где $Ln = La, Pr, Nd$. Комплексом методов, включающим структурный анализ с использованием рентгеновского и синхротронного излучений, электронной микроскопии и ЭДС-микроанализа, изучены высокотемпературная тетрагональная модификация и низкотемпературная моноклинная, существующая только для Nd_2MoO_6 . Установлено, что при комнатной температуре кристаллы тетрагональной фазы Nd_2MoO_6 относятся к пр. гр. $I4_1/acd$, а кристаллы Pr_2MoO_6 и La_2MoO_6 – к пр. гр. $I-42m$, что согласуется с выявленным на этих кристаллах пьезоэффектом. Моноклинная фаза Nd_2MoO_6 существует при комнатной температуре в пр. гр. $I2/c$ и имеет принципиальные отличия в распределении атомов Nd и Mo. В структуре допированных кристаллов атомы магния частично замещают атомы молибдена. С нагревом образцов происходит увеличение проводимости, что может быть связано с упорядочением вакансий, возникающих при вхождении двухвалентного магния в позиции шестивалентного молибдена.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №18-29-12005) и Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

1. В. К. Яновский, В. И. Воронкова. Физика твердого тела. 19, 3318 (1977).
2. Voronkova V., Orlova E., Kazakov S. et al. Eur. J. Inorg. Chem. 2016. V. 2016. P. 1022.

Исследование анизотропной микроструктуры керамики ZnO:(Ga, B), полученной методом искрового плазменного спекания

А. Ш. Асваров^{1, 2}, А. Э. Муслимов¹, А. К. Ахмедов², В. М. Каневский¹

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия

Керамика на основе ZnO, легированного элементами III группы, представляет интерес как в качестве альтернативного материала для замены дорогостоящего двойного оксида индия-олова, широко используемого для формирования прозрачных тонкопленочных электродов [1], так и качестве перспективного термоэлектрического материала [2]. Естественно, требования, предъявляемые к керамическим мишеням для магнетронного распыления и термоэлектрической керамике, разнятся. Для разработки технологий, обеспечивающих проявление тех или иных функциональных свойств керамики на основе ZnO, необходимы детальные исследования того, как влияют технологические условия того или иного метода формовки на микроструктуру и физические свойства синтезируемой керамики. Известно, что в процессе получения керамики различными методами в ней зачастую возникает текстура и связанная с ней анизотропия физических свойств из-за наличия преимущественной направленности внешних формирующих сил.

Цель данной работы – установление особенностей микроструктуры керамики ZnO:(Ga, B), синтезированной методом искрового плазменного спекания (spark plasma sintering), и изучение влияния формирующейся текстуры в синтезированной керамике на анизотропию ее функциональных характеристик. Предварительно были синтезированы наборы образцов керамики ZnO:(3at% Ga, 0.2 at% B) с различной микроструктурой и степенью текстуры путем варьирования условий искрового плазменного спекания (прикладываемое давление, тепловая нагрузка и длительность полки на максимальной температуре). В докладе будут представлены результаты исследования микроструктуры и степени анизотропии синтезированных образцов, полученных с использованием методов порошковой рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии.

Работа проведена в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий» на 2019.

1. A. Abduev, A. Akmedov, A. Asvarov, A. Chiolerio, Plasma Processes and Polymers. 725, 12 (2015).
2. M. Ullah, W.B. Su, A. Manan, A.S. Ahmad, A.A. Shah, Zh. Yao, Ceramics International. 17873, 44 (2018).

Фотолюминесценция нанокompозитной системы $\text{Ge}_{\text{nc}}@AAO$

А. Н. Бельтюков¹, И. К. Аверкиев^{1,2}, Р. М. Закирова², В. А. Волков¹

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

² Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

Нанокompозитные системы, представляющие включения полупроводниковых нанокристаллов в диэлектрической оксидной матрице, рассматриваются как одни из перспективных материалов активных элементов современной оптоэлектроники [1]. В настоящей работе рассматривается новый метод формирования нанокристаллитов германия в матрице пористого анодного оксида алюминия, и приводятся исследования фотолюминесцентных свойств, полученной нанокompозитной системы ($\text{Ge}_{\text{nc}}@AAO$). В основе метода лежит анодное окисление многослойной пленки Al/Ge с последующим восстановительным отжигом. Многослойные пленки, состоящие из двух слоев алюминия толщиной по 100 нм и среднего слоя германия толщиной 30 нм, осаждались методом вакуумного термического напыления. После осаждения пленки отжигались при температуре 100 °С в течение 1 часа. Анодирование осуществлялось в электрохимической ячейке в 0,3 М растворе щавелевой кислоты при постоянном напряжении 40 В и температуре 5 °С. Как было показано ранее в работе [2], полученные в данных режимах оксидные пленки состоят из пористых слоев оксида алюминия и оксида германия. Отжиг в среде водорода при температуре 500 °С приводит к восстановлению германия. Спектры фотолюминесценции возбуждались лазерным излучением с длиной волны 532 нм. Полоса излучения с максимумом около 665 нм связывается с излучением нанокристаллитов германия (рис.).

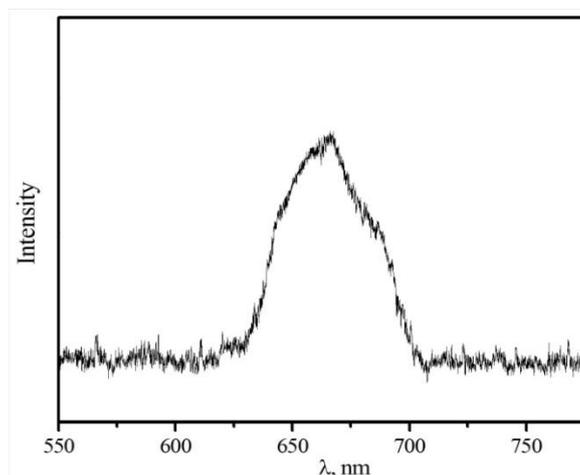


Рис. Спектр фотолюминесценции нанокompозитной системы $\text{Ge}_{\text{nc}}@AAO$

Работа поддержана грантом РФФ № 17-79-10285.

1. Priolo, T. Gregorkiewicz, M. Galli, T.F. Krauss Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics, Nature Nanotechnology, Vol. 9, pp. 19–32, 2014.
2. Beltiukov, A.N., Stashkova, E.V., & Boytsova, O.V. Anodic oxidation of Al/Ge/Al multilayer films. Applied Surface Science, 459, 583–587, 2018.

Оптически активные материалы на основе мезокристаллов V-TiO₂

*О. В. Бойцова^{1,2}, А. Г. Соболев², Д. И. Петухов²,
А. А. Елисеев², А. Н. Бельтюков³, А. Босак⁴*

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

³ *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

⁴ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Материалы с упорядоченной структурой (мезокристаллы-МК) могут проявлять различные свойства, интересные для применений, такие как электрические, оптические, магнитные и др. Особый интерес представляет получение МК TiO₂, так как он обладает значительными фотокаталитическими свойствами и является одним из самых распространенных объектов исследований. Для получения необходимой структуры важно использовать полимерную матрицу, которая будет приводить к росту частиц TiO₂ в определенном направлении. Другим интересным материалом является VO₂, который при 68 °С претерпевает фазовый переход диэлектрик-металл. При этом значительно изменяется проводимость VO₂ (до 5 порядков в объемном кристалле) и его отражательная способность. Это может найти применение в оптических затворах, умных окнах и других областях со сверхбыстрым переключением.

Целью данной работы было получение мезокристаллов V-TiO₂ с разным содержанием ванадия и исследование их микроструктуры, морфологии, состава и функциональных свойств. Все полученные порошки были охарактеризованы с помощью методов РФА (в том числе впервые с использованием синхротронного излучения для изучения процесса протекания термического разложения смесей порошков NH₄TiOF₃ [1] и NH₄VO₃), РЭМ, ПЭМ ВР, РФЭС, КР-спектроскопии. Впервые была показана возможность образования мезокристаллов твердого раствора Ti_{1-x}V_xO₂ с содержанием ванадия до 25 ат. %. Наибольшая фотоактивность (0,257%/мин) наблюдалась в порошках состава Ti_{0,99}V_{0,1}O₂, что выше соответствующего значения для недопированных МК TiO₂.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (18-73-10212).

1. O. Boytsova, I. Dovgaliuk, D. Chernyshov, A. Eliseev, P. O'Brien, A. J. Sutherland and A. Bosak. *J. Appl. Cryst.* 52, 23–26 (2019).

Алмазная фотоника: настоящее и будущее

К. Н. Болдырев

Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

Развитие технологий получения алмазов открыло огромные перспективы их применений в различных областях науки и техники – от медицинских применений до алмазной электроники. Особенный интерес представляет алмаз в качестве элементов фотоники, что возможно благодаря контролируемому вводу легирующих и излучающих примесей (так называемых центров окраски), как ранее известных, так и совсем новых. Свойства таких центров окраски позволяют применять эти материалы в множестве настоящих и будущих приложений – в качестве квантовых сенсоров, элементов квантовой памяти, наночастиц для прижизненной визуализации биологических тканей и биопроцессов в организме, детекторов (сцинтилляторов) ионизирующего излучения, источников одиночных фотонов и др. В ряде центров был продемонстрирован оптически детектируемый магнитный резонанс (ODMR), показавший очень большую чувствительность к внешним факторам, что открывает невероятные возможности для их использования в качестве точечных сенсоров. В частности, уже были продемонстрированы точечные детекторы температуры (с точностью до мК), магнитного поля (до нТл, с возможностью определять направление и величину магнитного поля от одиночного атома или молекулы), электрических полей, деформаций, давлений.

Доклад будет посвящен как уже известным центрам окраски (NV и SiV [1–3]), так и новому, связанному с примесью германия (GeV) [4, 5], который излучает в красно-оранжевой области спектра. Будут обсуждаться интересные изотопические эффекты [2–4]; оптические свойства, такие как времена затухания люминесценции и квантовый выход [5]; возможности практического применения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-72-10293.

1. В. А. Давыдов, А. В. Рахманина, С. Г. Ляпин, И. Д. Ильичев, К. Н. Болдырев, А. А. Ширяев, В. Н. Агафонов, Письма в ЖЭТФ 99, 673 (2014).
2. V. Sedov, K. Boldyrev, V. Krivobok, S. Nikolaev, A. Bolshakov, A. Khomich, A. Khomich, A. Krasilnikov, V. Ralchenko, Phys. Status Solidi A 00, 1700198 (2017).
3. V.G. Ralchenko, V.S. Sedov, A.K. Martyanov, A.P. Bolshakov, K.N. Boldyrev, V.S. Krivobok, S.N. Nikolaev, S.V. Bolshedvorskii, O.R. Rubinas, A.V. Akimov, A.A. Khomich, E.V. Bushuev, R.A. Khmel'nitskiy, V.I. Konov, ACS Photonics 6(1), 66–72 (2019).
4. E.A. Ekimov, S.G. Lyapin, K.N. Boldyrev, M.V. Kondrin, R. Khmel'nitskiy, V.A. Gavva, T.V. Kotereva, M.N. Popova, Письма в ЖЭТФ 102, 811 (2015).
5. K.N. Boldyrev, B.N. Mavrin, P.S. Sherin, M.N. Popova, Journal of Luminescence 193, 119–124 (2018).

Модификация поверхности пор как метод управления релаксацией несмачивающей жидкости, диспергированной в нанопористой среде

С. А. Бортникова¹, А. А. Белогорлов¹, П. Г. Мингалев²

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

Нанопористые среды являются перспективными материалами для использования во многих областях науки и техники. Так, например явление релаксации несмачивающей жидкости диспергированной в нанопористой среде [1], зависящее от внешних условий и свойств системы, может быть использовано в медицине и устройствах контроля. Одним из важных параметров, отвечающих за управление данным явлением, является модификация поверхности пористой среды. Ранее было показано [2], что модификация поверхности позволяет менять поведение диспергированной жидкости от полного невытекания, до практически полного вытекания из пористой среды.

В работе представлены результаты исследования нанопористой среды (Fluka100C₈+C₁). Нанопористая среда Fluka100C₈+C₁ была получена путем дополнительной модификации коммерческого образца Fluka 100C₈ (#60755, Sigma-Aldrich). Дополнительная модификация образца была проведена в лаборатории профессора Г. В. Лисичкина (МГУ им. М. В. Ломоносова). Исследования проводились методами низкотемпературной сорбции азота, жидкостной порометрии и дополнительными методиками жидкостной порометрии: многочастичное заполнение и временная релаксация. Проведено качественное сравнение результатов ранее исследованного образца Fluka 100C₈ [3] и Fluka100C₈+C₁. Показана возможность использования дополнительной модификации для управления релаксацией несмачивающей жидкости диспергированной в нанопористой среде.

1. V.D. Borman, A.A. Belogorlov et al., Phys. Rev. E 93, 2 (2016).
2. C.V. Suci, T. Iwatsubo et al., J. of Coll. and Int. Sci. 283 (2005).
3. A.Yu. Emelianova, S.A. Bortnikova and A.A. Belogorlov, IOP Conf. Series: J. of Phys.: Conf. Series 1099, 1 (2018).

Исследование надмолекулярной структуры магнитных эластомеров на основе сегментированных полиуретанов с наночастицами ферритов и динамики ее изменения при релаксационных термических переходах методом МУРПН

*А. Н. Бугров^{1, 2}, В. В. Рунов³, Р. Ю. Смыслов^{1, 3},
Г. П. Котица^{3, 4}, А. Феоктистов⁵, В. Пупич⁵*

¹ *Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

⁴ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Julich Centre for Neutron Science, Garching, Germany*

Разработка новых высокотехнологичных материалов с магниторегулируемыми свойствами памяти формы невозможна без понимания основных закономерностей взаимосвязи структуры, свойств, механизмов деформации и термосимулируемой релаксации в условиях магнитного поля. В связи с этим целью данного исследования было проанализировать методом МУРПН мезоструктуру магнитных эластомеров на основе сегментированного полиуретанимида с ковалентносвязанными наночастицами ферритов.

Для формирования жестких ароматических блоков полимерной матрицы были использованы 2,4-толуилендиизоцианат (ТДИ) и 1,3-бис(3'4-дикарбоксифенокси) бензол (Р). В основу гибкого сегмента входил полиэтиленадипат (ПЭА) диол (ММ ~ 2500), а в качестве удлинителя цепи выступал ароматический диамин 4,4'-бис-(4-аминофенокси)дифенилсульфон (СОД) наряду с наночастицами CoFe_2O_4 и $\text{Al}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, поверхностно функционализированными аминогруппами.

Согласно данным ДСК для чистой матрицы (Р-ТДИ-ПЭА2500-ТДИ-Р)СОД температура стеклования ($T_{\text{ст}}$) гибкой фазы составила -31°C . При переходе через нее гибкие сегменты макромолекулярных цепей размораживаются, переходя из стеклообразного в высокоэластическое состояние. Далее на кривых ДСК в области 35°C наблюдается начало растянутого во времени эндотермического эффекта плавления упорядоченных друг относительно друга гибких сегментов макромолекул мультиблок-сополимера. Ковалентное присоединение в процессе синтеза 10 мас.% магнитомягких или магнито жестких наночастиц ферритов к матрице (Р-ТДИ-ПЭА2500-ТДИ-Р) СОД способствует лучшему упорядочению гибких сегментов, что проявляется в увеличении величины теплового эффекта.

Методом МУРПН были определены структурные параметры ядерной и магнитной подсистем полимер-неорганических композитов. Качественно показано, что при температуре релаксационного перехода (-31°C) картина магнито-ядерного рассеяния кардинальным образом меняется в связи с увеличением подвижности и флуктуацией гибких блоков в композиционном материале.

Тонкие кристаллические пленки ферритов никеля, кобальта и висмута: получение и магнитно-силовая микроскопия

А. В. Буташин, А. Э. Муслимов, В. М. Каневский

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

В последнее время возрос интерес к исследованию пленок ферритов висмута, кобальта и никеля в связи с обнаружением уникальных магнитных свойств в деформированном состоянии. Присутствие упругих напряжений в пленке BiFeO_3 [1] может позволить существенно снизить величину критического поля перехода из состояния с пространственной модуляцией спинов в однородное магнитное состояние. Так же можно получить экстремально высокое значение коэрцитивного поля в напряженных нестехиометрических пленках CoFe_2O_4 [2]. В данной работе исследованы магнитные свойства пленок ферритов, механические напряжения в которых изменялись подбором кристаллографической ориентации (А, R, С) подложек сапфира.

Были получены пленки ферритов NiFe_2O_4 и CoFe_2O_4 , испытывающие деформацию сжатия, в которых при 300К коэрцитивные поля составляли 32,5 и 65 мТ, соответственно. В таких пленках методом магнитно-силовой микроскопии была сформирована доменная структура, сохранявшаяся длительное время. Это позволяет считать такие материалы перспективными в технологии высокоплотной записи и в качестве биотропных наноструктур.

Также получены пленки системы $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{39}\text{-BiFeO}_3$ на R-плоскости сапфира, в которых с использованием метода магнитно-силовой микроскопии наблюдалось обратное магнитоэлектрическое переключение без нанесения обменно-связанных слоев. Был проведен подсчет магнитного момента нанокристаллов, предполагая модель взаимодействия зонда и нано-кристаллов, как взаимодействие двух постоянных магнитов и, считая, что вся намагниченная часть зонда сосредоточена в центре иглы зонда. Было получено приблизительное значение магнитного момента нанокристалла с линейными размерами 5×5 мкм и высотой 20 нм порядка $10^{-8} \div 10^{-9}$ едм.

Авторы благодарны РФФИ за поддержку исследований пленок ферритов никеля, кобальта (грант № 18-02-00515 а) и висмута (грант № 18-29-12099 мк).

1. З. В. Гареева и др. // Письма о материалах. 3, 99 (2013).
2. S. Shirsath et al. // Sci. Reports. 6, 30074. (2016).

Локальная атомная структура двумерных слоев соединения класса MXene состава $Ti_3C_2T_x$ ($T = O, OH, F$)

Р. Г. Валеев¹, О. Р. Бакиева¹, А. А. Елисеев², А. С. Кан², Д. И. Петухов²

¹ *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

MXene – графено-подобные 2D-структуры на основе карбидов и нитридов d-металлов, были открыты сравнительно недавно, но уже получили широкое распространение среди исследователей и технологов как перспективные материалы для различных применений в суперконденсаторах, Li-ионных батареях, датчиках, материалах для электрохимического хранения энергии [1–4].

Известно, что MXene получают селективным травлением металла, например, алюминия, в тройных карбидах или карбонитридах с общей формулой $M_{1+n}AX_n$, где M – d-металл, A – элемент 13 или 14 группы Периодической системы элементов Менделеева, X – углерод и/или азот. Элемент A можно вытравить химическими методами без разрыва связей между элементами M и X , но их стабилизируют введением атомов кислорода, фтора или OH-групп [1]. Затем MXene могут быть разделены на отдельные слои, содержащие атомы M - X основы и остатки связующих функциональных групп (O, -OH или F). Также известно, что структуры MXene на основе Ti_3C_2 имеют гексагональную решетку типа $R\bar{6}_3/mmc$ с параметрами $a=b=3.0505(5)$ Å, $c=19.86(2)$ Å [5]. При этом локальная атомная структура ранее не исследовалась.

Последние 20 лет, благодаря большей доступности просвечивающих электронных микроскопов, появилась возможность получать спектры энергетических потерь электронов с высоким энергетическим разрешением, что позволяет исследовать также локальную атомную структуру образцов. В данной работе образцы Ti_2C_3 MXene были получены путем травления MAX фазы в плавиковой кислоте с последующим ее расщеплением при тетраметиламмоний гидроксида с последующей очисткой методом диализа. Спектры энергетических потерь электронов (англ. аббревиатура EELS – Electron Energy Loss Spectra) регистрировали с помощью просвечивающего электронного микроскопа Carl Zeiss Libra 200MC. Высокое разрешение Ti- L_{23} , O-K, C-K спектров позволило выделить в низкоэнергетичной области после краев характеристических потерь возбуждаемых атомов осциллирующие части, называемые тонкой структурой спектра энергетических потерь электронов (англ. аббревиатура EELFS – Electron Energy Loss Fine Structure) [6]. Данные структуры формируются аналогично XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) и так же содержат информацию о локальном атомном окружении возбуждаемого атома. Анализ EELFS-спектров проведен методом Фурье-преобразования, получены параметры длин химической связи Ti-C (2.0 Å), Ti-Ti (2.2 Å, 4.5 Å), Ti-O (2.2 Å, 4.8 Å) (рис.).

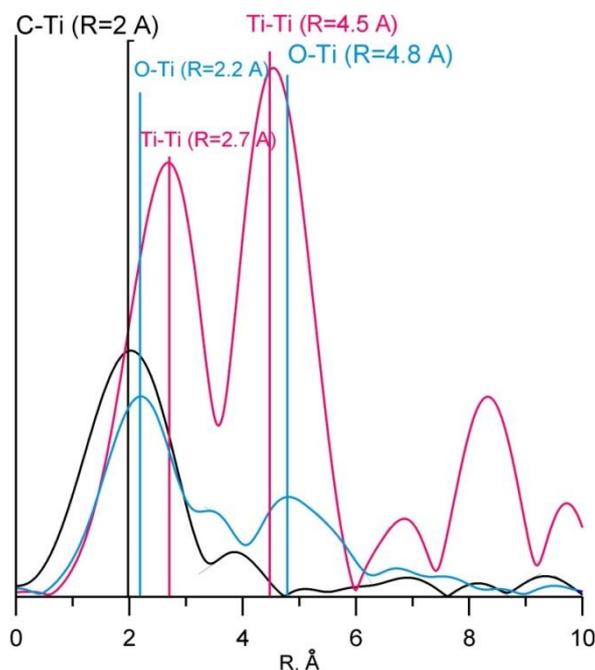


Рис. Фурье-образы EELFS спектров К-края О, К-края С и L_{23} -края Тi

Моделирование и проведение расчетов параметров локальной атомной структуры выполнены в рамках Госзадания отдела Физики и химии поверхности УдмФИЦ УрО РАН (№ гос. регистрации АААА-А17-117022250040-0).

1. M. Naguib, V.N. Mochalin, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, *Adv. Mater.* 26, 992 (2014).
2. M. Naguib, J. Come, B. Dyatkin, V. Presser, P.L. Taberna, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, *Electrochem. Comm.* 16, 61 (2012).
3. J. Come, M. Naguib, P. Rozier, M.W. Barsoum, Y. Gogotsi, P.L. Taberna, M. Morcrette, and P. Simon, *J. Electrochem. Soc.* 159, A1368 (2012).
4. M.R. Lukatskaya, O. Mashtalir, C.E. Ren, Y. Dall'Agnesse, P. Rozier, P.L. Taberna, M. Naguib, P. Simon, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, *Science* 341, 1502 (2013).
5. C. Shi, M. Beidaghi, M. Naguib, O. Mashtalir, Y. Gogotsi, and S.J.L. Billinge, *PRL* 112, 125501 (2014).

Получение и исследование структуры нанопокровтий железа, полученных на поверхности пористого анодного оксида алюминия

Р. Г. Валеев¹, А. С. Алалыкин²

¹ *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Железо, никель, кобальт, платина, другие 3d-металлы и металлы платиновой группы, их сплавы и соединения с интерметаллидами традиционно используются в качестве катодов при электролитических реакциях выделения водорода (РВВ) в процессе электролиза из кислых и щелочных водных растворов [1]. Железо особо выделяется среди них тем, что, по сравнению с металлами платиновой группы имеет низкую стоимость и достаточно широко распространено [2, 3]. Следует отметить, что эффективность РВВ напрямую зависит от площади контакта материала катода с электролитом, поэтому в литературе имеется повышенный интерес к материалам на основе железа, имеющим развитую поверхность вследствие формирования наноразмерных частиц металла различной морфологии [4]. Это связано с большим вкладом поверхностных электронных состояний металла в процессе РВВ. Также большое влияние оказывают структурно-фазовое состояние и электронная структура, обуславливающие химическую активность железа.

Целью данной работы является разработка методики осаждения железа на высокоразвитую поверхность мембран пористого анодного оксида алюминия, исследование морфологии, структурно-фазового состояния и электронной структуры полученных образцов в зависимости от параметров пористой структуры пористого Al_2O_3 (диаметр пор, расстояние между отдельными порами). В перспективе будут исследованы катодные реакции выделения водорода и сделаны выводы о возможной взаимосвязи указанных выше характеристик на эффективность РВВ.

Работа выполнена в рамках Госзадания отдела Физики и химии поверхности УдмФИЦ УрО РАН (№ гос. регистрации АААА-А17-117022250040-0).

1. L.A. Kibler, Chem. Phys. Chem. 7, 985 (2006).
2. M.R. Gennero de Chialvo, A.C. Chialvo, Phys. Chem. Chem. Phys. 3, 3180 (2001).
3. J.O. Gil Posada, P.J. Hall, International Journal of Hydrogen Energy 41, 20807 (2016).
4. Y. Attia, M. Samer, Renewable and Sustainable Energy Reviews 79, 878 (2017).

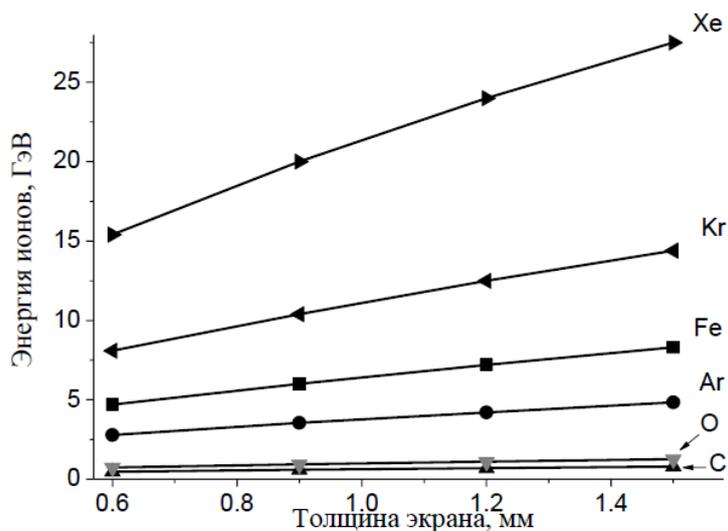
Моделирование прохождения тяжелых заряженных частиц в композиционном материале $W_{85}Cu_{15}$

Д. С. Васин, Д. И. Тишкевич, А. В. Труханов, С. С. Грабчиков

*ГО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь*

Обеспечение высокой надежности электронной техники в условиях повышенного уровня радиационных излучений различного вида, является актуальной задачей для разработчиков атомной, космической и ракетной техники [1]. В настоящее время разработаны множество способов уменьшения влияния радиационных излучений на работу электронных приборов. Обычно для решения проблем защиты аппаратуры от радиации используют: технологические, конструктивные и схемотехнические методы. В данной работе производится оценка способности экранировать тяжелые заряженные частицы (ТЗЧ) с помощью одного из композиционных материалов $W_{85}Cu_{15}$.

Для оценки способности экранировать ТЗЧ, с помощью программного комплекса SRIM было проведено моделирование пробегов ионов различной массы и энергии в материале $W_{85}Cu_{15}$, с задаваемой плотностью 16 г/см^3 . Результаты моделирования представлены на рисунке, из которого видно, что предельные энергии задерживаемых ионов линейно возрастают с увеличением толщины материала, а увеличение массы иона уменьшает длину его пробега в материале. Данный материал способен экранировать излучения в большом диапазоне энергий, что позволяет применять экраны на его основе для космической, авиационной и атомной техники.



1. Ионизирующие излучения космического пространства и их воздействие на бортовую аппаратуру космических аппаратов / Под ред. Г. Г. Райкунова. М.: Физматлит (2013). 256 с.

Влияние слабого импульсного магнитного поля на электрические свойства кристаллов CdTe:Fe, CdTe:Cl

И. С. Волчков, В. Б. Кварталов, М. Д. Павлюк, В. М. Каневский

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Влияние слабых импульсных магнитных полей ($\mu\text{В} \ll \ll \text{kT}$) на свойства и структуру немагнитных материалов [1] было обнаружено еще в 80-х годах XX века. Впоследствии было установлено [2], что при слабой магнитной обработке немагнитных кристаллов имеют место как эффекты *in situ*, так и постэффекты — длительная или постоянная «память» после экспозиции. Был обнаружен отклик на магнитную обработку широкого спектра свойств немагнитных материалов. В основе описываемого эффекта лежит магнитоиндуцированное преобразование примесных дефектных комплексов. Возможность такого преобразования позволяет с помощью слабых магнитных полей регулировать свойства полупроводниковых материалов [2, 3].

В качестве образцов исследований были выбраны полупроводниковые кристаллы CdTe, р-типа проводимости, легированные Fe или Cl, выращенные методом Обреимова-Шубникова. Легирование CdTe, в процессе роста, различными примесями (Fe или Cl) позволило создать в кристаллах различные системы примесных дефектных комплексов. Образцы CdTe проходили обработку в слабом импульсном магнитном поле ($B = 1 \text{ Тл}$, ν следования импульсов = 12 Гц, время обработки = 10 мин), после чего производилось измерения электрических характеристик исследуемых образцов, в течение длительных времен (до 200 часов). Полученные результаты сравнивались с результатами контрольной группы образцов, не подвергавшихся воздействию магнитного поля.

Полученные результаты говорят о значительном влиянии типа легирующей примеси на интенсивность изменения электрических характеристик, после магнитной импульсной обработки. Добавление Fe в виде легирующего компонента, в процессе выращивания, делает кристаллы CdTe более чувствительными к магнитной обработке. Наблюдаемые эффекты изменения проводимости кристаллов CdTe носят необратимый характер, что говорит о возможности использования магнитной импульсной обработки в качестве метода улучшения характеристик уже готовых, выращенных кристаллов.

1. В. М. Каневский, Г. И. Дистлер, В. В. Москвин и др., Докл. АН СССР, 268, 591 (1983).
2. Ю. И. Головин, ФТТ, 46, 769 (2004).
3. V.I. Alshits, E.V. Darinskaya, M.V. Koldaeva et al., Dislocations in Solids Vol. 14 (Ed. J P Hirth) (Amsterdam: Elsevier, 2008) p. 333.

Особенности ферромагнитных нанобластей в кубическом манганите $\text{Sr}_{0,98}\text{La}_{0,02}\text{MnO}_3$ по данным ЯМР ^{139}La

*А. Ю. Гермов¹, К. Н. Михалёв¹, З. Н. Волкова¹, А. П. Геращенко¹,
С. В. Верховский¹, Е. И. Константинова², И. А. Леонидов²*

¹ *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В последние годы интерес к электронно-допированным манганитам с кубической структурой (*Pm-3m*) значительно возрос [1, 2]. Например, было обнаружено металлическое поведение электросопротивления в кубическом SrMnO_3 при минимальном ($\sim 1\%$) допировании за счет гетеровалентного замещения Sr^{2+} на La^{3+} (Ce^{4+}) [3], которое объяснялось формированием фазы однородного металла с подкошенной антиферромагнитной структурой.

Подкос антиферромагнитной решетки сложно отличить от наноразмерных ферромагнитных неоднородностей по данным магнитной восприимчивости, поэтому актуален вопрос о причинах возникновения металлического характера проводимости. Локальный метод ЯМР позволяет наиболее эффективно исследовать особенности распределения сверхтонких полей, поскольку локальное магнитное поле на ядре-зонде напрямую определяет частоту детектирования ЯМР сигналов.

Например, в работах [4, 5] показано по данным ЯМР ^{55}Mn и ^{87}Sr , что в манганитах $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.02, 0.04$) реализуется неоднородное магнитное состояние, где антиферромагнитная матрица сосуществует с ферромагнитными нанобластями. Было также показано, что ферромагнитные области окружены так называемыми допированными проводящими областями, которые уже вблизи комнатной температуры близки к пределу перколяции.

В данной работе по данным ЯМР ^{139}La показано, что в исследуемых кубических манганитах ферромагнитные нанобласти формируются вблизи ионов La при слабом электронном допировании. Ионы лантана находятся как внутри ферромагнитных областей, так и в допированных проводящих областях в антиферромагнитной фазе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-32-00030 в рамках государственного задания по теме «Спин» № АААА-А18-118020290104-2.

1. H. Somaity et al., *Phys. Rev. Materials*, 2, 054408 (2018).
2. H. Sakai et al., *Phys. Rev. Lett.* 107, 137601 (2011).
3. H. Sakai et al., *Phys. Rev. B*, 82, 180409(R) (2010).
4. A. Germov et al., *JETP Letters*, 102, 727 (2015).
5. A. Germov et al., *Physical Review B*, 96, 104409 (2017).

Фрактальный анализ структуры эпоксидно-титанатных и эпоксидно-силоксановых нанокомпозитов, модифицированных ДНА разной концентрации и при различных температурных режимах

И. Б. Глебова, О. А. Шилова

Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Эпоксидно-титанатные (ЭТН) и эпоксидно-силикатные (ЭСН) нанокомпозиты представляют интерес в качестве защитных покрытий, в том числе используются как защитные биостойкие и самоочищающиеся покрытия. Введение наночастиц детонационного наноалмаза (DND), оказывает ингибирующее действие на развитие микроорганизмов – биодеструкторов. Для формирования таких материалов и покрытий используется золь-гель метод.

В работе с помощью малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) был проведен анализ фрактальной структуры ЭТН и ЭСН, модифицированных наноалмазами детонационного синтеза (ДНА) разной концентрации (0,5-0,2 мас. %) при различных температурных режимах гелеобразования до 160 °С.

Введение в ЭТН и ЭСН небольшого количества ДНА приводит к увеличению фрактальной размерности, т.е. к уплотнению и упрочнению формируемой структуры нанокомпозитов за счет образования массово-фрактальных кластеров, которые с увеличением концентрации ДНА становятся более плотными.

Осуществление гелирования золь при повышенных температурах, приводит к образованию массовых фракталов, плотность которых повышается с увеличением температуры.

Анализ данных МУРР ЭСН показал, что синтезированные представляют собой агрегационные структуры с одно- двухуровневой фрактальной организацией. Модификация ДНА способствует увеличению размеров рассеивающих массово-фрактальных агрегатов и их фрактальных размерностей. Обнаружено, что при увеличении температуры до 140–160 °С, а также длительности этого процесса фрактальная структура стремится к одноуровневой. Можно предположить, что одноуровневые фрактальные структуры будут обладать более прочной структурной сеткой, что положительно скажется на механических свойствах пленок.

Таким образом, ДНА является структурирующим реагентом.

Нанонити висмута и свинца: темплатное электроосаждение

А. С. Гончарова¹, О. В. Скрыбина², В. С. Столяров², К. С. Напольский¹

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

В последние десятилетия наноструктуры висмута и свинца привлекают повышенный интерес, который вызван, в первую очередь, наблюдением сверхпроводимости в таких наноструктурах и необычных физических свойств. Висмут обладает особыми электронными свойствами: малая концентрация носителей заряда ($n \approx 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при 4,2 К), малая эффективная масса носителей заряда ($m_{\text{eff}} \approx 10^{-3} m_e$). Висмут обладает экстремально большой длиной свободного пробега электрона: около 2 мкм при 300 К и до 1 мм при 4,2 К. Согласно [1, 2], критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние для нанонитей висмута оказывается значительно выше ($T_c > 1 \text{ К}$), чем для объемного висмута ($T_c \sim 0,53 \text{ мК}$). В нанонитях висмута можно наблюдать также множество квантово-размерных эффектов: осцилляции Шубникова – де Гааза, переход полуметалл-полупроводник, большое магнетосопротивление, термоэлектрические свойства. В случае наноструктур свинца температура перехода составляет примерно 7,2 К, что совпадает с критической температурой для объемного свинца. Интерес к наноструктурам свинца вызван тем, что, в отличие от объемного свинца, который является сверхпроводником I рода, они демонстрируют сверхпроводимость II рода [3, 4].

При работе с водно-органическими растворами, а также с электролитами с высокой концентрация солей, при электроосаждении металла возникает существенное омическое падение потенциала в растворе. Эффект приводит к плохо контролируемому электроосаждению металла, а значит, в таких условиях невозможно управлять кристаллографической ориентацией и морфологией формирующихся наноструктур изменяя потенциал электроосаждения. В представленной работе изучаются процессы электрокристаллизации висмута и свинца в пористых матрицах анодного оксида алюминия (АОА), сформированных в 0,3 М растворе $(\text{COOH})_2$ при напряжениях 40 и 120 В. Электрохимическое осаждение Vi проводили из электролитов, содержащих 0,1–0,4 моль/л $\text{Vi}(\text{NO}_3)_3$ в смеси этиленгликоля с водой (7:3 по объему), при потенциале $-0,2 \text{ В}$ относительно висмутового электрода сравнения в том же растворе. Электроосаждение свинца проводили при потенциале $-0,7 \text{ В}$ отн. Ag/AgCl электрода сравнения из нитратного электролита свинцевания: 0,1 моль/л $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$, 0,5 моль/л H_3BO_3 .

Полученные нанонити висмута обладают ярко выраженной текстурой: рост всех нанонитей происходит вдоль кристаллографического направления [11–20]. Измерение омического сопротивления раствора проводили с помощью процедуры прерывания тока. Полученные значения сопротивления для растворов, с содержанием 0,1 и 0,4 М нитрата висмута соответственно, равняются 400 и 200 Ом. В фиксированной геометрии ячейки, когда положение

электрода сравнения остается постоянным, нескорректированные значения потенциала осаждения от $-0,1$ до $-0,3$ В в случае гладких подложек соответствуют интервалу реального перенапряжения ниже 30 мВ (все потенциалы приведены относительно V_i электрода сравнения). При этом осаждение происходит в кинетическом режиме. Когда же мы переходим к осаждению в матрицах, то те же самые нескорректированные значения потенциала осаждения от $-0,1$ до $-0,3$ В уже будут соответствовать реальным перенапряжениям значительно большим, чем 30 мВ. При этом рост металла происходит в области смешанного и диффузионного контроля. Это связано с тем, что реальная поверхность растущего металла в матрице определяется ее пористостью, что приводит к уменьшению iR вклада в общее значение прикладываемой разности потенциалов.

Температурные зависимости сопротивления для Nb/Bi/Nb-структур в диапазоне 300–1,2 К показали полупроводниковый характер проводимости в полученных нанонитях. В изученных образцах вплоть до 1,2 К переход в сверхпроводящее состояние не наблюдался.

В случае электрокристаллизации свинца из указанного выше нитратного электролита было показано, что при потенциале $-0,75$ В достигается наибольшая степень заполнения матрицы металлом. В случае электроосаждения из данного электролита также наблюдается довольно большой iR вклад, правда уже не за счет высокого сопротивления, которое составляет около 70 Ом (при $E_d = -0,75$ В), а из-за высоких плотностей тока. Данные РФА нанокompозита Pb нанонити/матрица АОА подтверждают формирование металлической фазы Pb, со следовыми количествами оксидной фазы (предположительно локализованной на поверхности нанонитей).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 18-73-10151.

1. M.L. Tian et al., Nano Lett. 9, 3196 (2009).
2. M.L. Tian et al., Nano Lett. 15, 1487 (2015).
3. S. Michotte et al., Physica C: Superconductivity 377, 267 (2002).
4. A. Riminucci et al., J. App. Phys. 115, 223910 (2014).

Особенности образования сегнетоэлектрической фазы в квантовом параэлектрике SrTiO_3

Е. Д. Горьковская, А. Г. Разумная, В. И. Торгашев

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Титанат стронция относится к классу виртуальных сегнетоэлектриков и его изучение представляет как фундаментальный, так и прикладной интерес в связи с наличием ряда специфических свойств в низкотемпературной области, таких как диэлектрическое плато при температуре 4 К. Квантовый параэлектрик SrTiO_3 можно перевести в сегнетоэлектрическое состояние путем приложения механического напряжения или при замещении атомов Sr изовалентными ионами, что приводит к подавлению аномально большой амплитуды квантовых флуктуаций атомов Ti. Это приводит к образованию сегнетоэлектрической фазы в титанате стронция при ненулевых температурах [1, 2].

В данной работе были изучены керамические образцы SrTiO_3 , допированного Pb, методом комбинационного рассеяния света в широком интервале температур для определения влияния концентрации примесей на образование сегнетоэлектрической фазы. Образцы керамики $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ ($x = 0, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.1$) были изготовлены методом твердофазного синтеза с использованием стехиометрических смесей SrO_2 , TiO_2 and PbO .

При комнатной температуре спектры КРС $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ содержат широкие линии второго порядка, обусловленные фононным взаимодействием. При охлаждении образцов в спектрах КРС на частотах ~ 170 и $\sim 540 \text{ cm}^{-1}$ появляются узкие линии на фоне широких полос. Стоит отметить, что их частоты не зависят от температуры. Экстраполяция температурной зависимости интенсивности этих мод позволяет предположить, что увеличение концентрации примеси повышает температуру фазового перехода.

Особый интерес представляет низкочастотная область спектров КРС $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$. При охлаждении, в низкочастотной области спектра появляются две узкие линии, частоты которых значительно меняются с температуры. Появление этих мод может означать образование сегнетоэлектрической фазы в допированном квантовом параэлектрике титанате стронция.

1. H. Uwe and T. Sakudo, 13, 271 (1976).
2. K.A. Müller, Phys. Rev. B 19, 3593 (1979).

Исследование электронной структуры халькогенидов переходных металлов MQ_x ($M = Mo, Ti$; $Q = S, Se$; $x = 2, 3, 5$), замещенных по атому металла и халькогена методами высокоэнергетической спектроскопии

С. А. Грибанова^{1, 2}, А. Д. Федоренко¹, А. Ю. Леднева¹, С. Б. Артемкина^{1, 2}

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

² *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

Халькогениды переходных металлов – широкий класс соединений, вызывающих интерес в связи с их возможностью применения в различных областях науки и техники. Дихалькогениды переходных металлов MQ_2 ($M = Mo, Ti$; $Q = S, Se$) представляют класс слоистых соединений, свойства которых широко варьируются в зависимости от типа атома металла или халькогена. Неизовалентное замещение даже небольшого количества атомов способно приводить к значительным изменениям в проводящих свойствах, реакционной способности, в том числе и каталитическую активность данных объектов. Так, допирование $TiSe_2$ ниобием и серой приводит к увеличению проводимости. Замещение как по халькогену так и по металлу приводит к увеличению термоЭДС в несколько раз, что связано с одновременным увеличением концентрации носителей заряда, и, в то же время, уменьшением их длины свободного пробега за счет рассеивания на структурных дефектах. Исследования термоэлектрических свойств прессованного образца $Ti_{0.98}Nb_{0.02}Se_{1.3}S_{0.7}$ показало, что при его отжиге в вакууме проводимость значительно улучшилась. Также были изучены полихалькогениды переходных металлов MQ_3 и MQ_5 ($M = Mo, Ti$; $Q = S, Se$), в которых помимо Q^{2-} группы, присутствует $(Q_2)^{2-}$ группа. Дихалькогенидная группа может представлять собой резервуар электронной плотности, благодаря чему соединение может проявлять как донорные, так и акцепторные свойства.

В данной работе использовалась совокупность методов рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии, которая позволяет провести детальное исследование электронной структуры исследуемых вещества в широком энергетическом интервале. Были получены рентгеновские фотоэлектронные спектры и рентгеновские эмиссионные спектры основных уровней, дающие информацию о зарядовом состоянии атомов, входящих в структуру исследуемых веществ. Проведен анализ парциальных атомных вкладов в вершину валентной зоны, в зависимости от наличия дихалькогенидной группы $(Q_2)^{2-}$ и атомов допанта. Показано, что замещение по атому металла существенно изменяет распределение nd состояний металла, и не влияет на распределение np состояний халькогена, в то время как замещение по халькогену, изменяет парциальные вклады отдельных атомных состояний металла и халькогена в структуру валентной зоны.

Авторы выражают благодарность РФФИ (Проект № 18-03-01061 А) за поддержку работы.

Получение углеродных сорбентов на основе жидких продуктов пиролиза

*Г. Д. Гусейнов, Х. Д. Ибрагимов, Н. Г. Кулиев, К. М. Ахундова,
З. М. Ибрагимова, А. Х. Набиева*

Институт нефтехимических процессов им. Ю. Г. Мамедалиева НАНА, Баку, Азербайджан

Получение активных углеродных адсорбентов из дешевого и доступного сырья (тяжелые нефтяные остатки, жидкие продукты пиролиза) является весьма актуальным, поскольку они имеют определенное преимущество перед другими видами сырья, а именно: постоянство свойств при относительно больших объемах производства и возможность контролировать процесс их получения. С целью получения углеродных сорбентов различной структуры фракция C_5 жидких продуктов пиролиза (ЖПП), выкипающая при температуре 30–70 °С была подвержена пиролизу на установке CVD и выявлено влияние различных параметров на процесс. Установлено, что при осуществлении пиролиза указанной фракции при температуре 800 °С в атмосфере инертного газа (15 см³/мин) и подаче водорода (40 см³/мин) в течение 20 минут образуются наноструктурированные углеродные (НУ) материалы с выходом 14,9 %. Форма, структура и размеры частиц полученных углеродных образцов определены методом сканирующей электронной микроскопии и установлено, что синтезированные при 650 °С НУ частицы состоят из хаотически расположенных в различных направлениях углеродных нанотрубок с диаметром 31 ± 3 нм и длиной 70 ± 5 нм. С повышением температуры (800 °С) в НУ частицах происходит их упорядочивание. Этот эффект может быть связан с легкой десорбцией из каталитических центров водорода, образующегося в результате деструкции фракции C_5 . Согласно результатам метода Раман спектроскопии полученные материалы состоят в основном из многостенных углеродных нанотрубок. Соотношение амплитуд D/G пиков указывает на то, что в синтезированных нанотрубках «дефект» структуры составляет 89–91 %, а углеродные нанотрубки на 99,3 % (масс.) состоят из элемента-углерода.

С целью получения углеродного адсорбента тяжелая смола пиролиза (ТСП), выкипающая при температуре выше 200 °С предварительно термически перерабатывалась при температуре 400 °С в течение 3-х часов, затем материал подвергался в присутствии щелочи NaOH (2:1) пиролизу на установке CVD при температуре 600 °С в течение 2 часов. Следует отметить, что термообработка ТСП перед термохимической активацией позволяет снизить удельный расход гидроксида натрия на единицу получаемого угля, повысить его адсорбционные свойства. Выход углеродного материала составляет 39 %. Эффективность активации объясняется способностью атомов натрия внедряться между слоями в формирующиеся НУ кристаллитов, расширяя пространство между соседними углеродными слоями, и приводя к увеличению удельной площади поверхности. Вскрытые углеродные слои в этом случае становятся доступными для дальнейшего газового активирования. Промывка полученного образца водой

сопровождается удалением соединений щелочи из объема сорбента и формированием межслойных пор, по размеру соответствующих атомному радиусу натрия и таким образом, активация карбонизатов ЖПП позволяет синтезировать сорбенты с развитым объемом микропор.

Для образцов синтезированных нами углеродных адсорбентов были сняты изотермы адсорбции-десорбции азота, исходя из которых, оценивались параметры их пористой структуры. Активация углерода щелочью оказывает существенное влияние на удельную поверхность и объем пор, сорбирующие свойства и соответственно развитость структуры микропор. При этом адсорбционная емкость активированного углерода по азоту повышается до 700 мг/г, $S_{\text{ВЕТ}}$ до $210 \text{ м}^2/\text{г}^{-1}$, диаметр пор составляет $d_p = 3,12 \text{ нм}$.

Структура и свойства полученных карбонизатов подтверждены физическими методами (ЭМ, ДТА/ТГ, RSA, АСМ) анализа.

Исследование особенностей микроструктуры и электродинамического поведения промышленных 2G ВТСП с искусственными центрами пиннинга различной природы

П. Н. Дегтяренко¹, С. Ю. Гаврилкин², А. В. Овчаров³, Е. И. Суворова⁴

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

² Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁴ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

В работе представлены результаты систематических исследований микроструктуры и электрофизических параметров в промышленных высокотемпературных сверхпроводящих лентах (2G ВТСП) с искусственными центрами пиннинга (ИЦП), на которых может происходить локализация вихрей Абрикосова. Одна часть образцов представляла собой GdBCO ВТСП пленки, полученные методом импульсного лазерного осаждения со скоростью 750 нм/мин с использованием мишеней с различной концентрацией примесей BaSnO_3 (от 6 до 18 мол. %) и BaZrO_3 (6 мол. %). Другая часть образцов – композиты на основе YBCO – содержали центры пиннинга, созданные высокоэнергетическими (до 167 МэВ) ионами Хе с флюенсами до $5 \cdot 10^{11}$ 1/см². Исследование микроструктуры сверхпроводящих материалов проводилось методом просвечивающей электронной микроскопии на электронных микроскопах Titan 80-300 (FEI, USA) и Osiris (FEI, USA). Показано, что в образцах GdBCO, ИЦП являются хорошо ориентированные в матричном кристалле вытянутые наночастицы BaSnO_3 и BaZrO_3 диаметром 5–7 нм. В облученных тяжелыми ионами Хе образцах YBCO центрами пиннинга являются радиационно-поврежденные области с разной морфологией и диаметром 3–5 нм. Проведены исследования электрофизических свойств обоих типов образцов с ИЦП в магнитных полях: получены кривые намагничивания в полях до 9 Тл и при температурах от 4.2 до 77 К, включая измерения остаточного магнитного момента для определения температуры перехода. Установлено, что введение ИЦП для обоих типов образцов позволяет повысить лифт-фактор (увеличение плотности критического тока, измеренного при температуре и поле, при котором проводится измерение в сравнении с плотностью критического тока, измеренного при температуре 77 К в собственном поле) и значительно снизить анизотропию критического тока в сильных магнитных полях до $B = 9$ Т в интервале температур 4.2–77 К.

1. V. Chepikov et al., IEEE Trans. Appl. Supercond., 27, 8000905 (2017).
2. A. Molodyk et al., Supercond. Sci. Technol., 30, 124001 (2017).
3. V. Sychugov et al., J. of phys.: conf. ser., 747, 012048 (2016).

Исследование распределения намагниченности в сегментированных нанонитях никель-медь при помощи микромагнитного моделирования и SQUID-магнитометрии

*И. С. Дубицкий¹, Е. Г. Яшина^{1, 2}, А. Х. Елмакави²,
С. В. Сотничук³, А. А. Мистонов²*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

В последние годы был достигнут существенный прогресс как в понимании механизмов перемагничивания отдельных ферромагнитных нанонитей так и в объяснении и предсказании свойств массивов взаимодействующих элементов [1]. Следующий шаг состоит в переходе к изучению магнитных свойств сегментированных нитей, представляющих собой трехмерную систему [2]. Данные структуры могут быть использованы в спинтронике, также на их основе возможно создание принципиально новых устройств хранения информации.

Настоящая работа посвящена изучению распределения намагниченности в сегментированных нанонитях никель-медь. Нанонити были синтезированы методом темплатного осаждения в пористые мембраны анодного оксида алюминия. Метод хроноамперометрии позволил контролировать длину осаждаемых сегментов. Анализ качества полученных образцов проводился с помощью СЭМ. Диаметр нанонитей составил 58 нм, расстояние между центрами – 100 нм. Нанонити образовывали неупорядоченные гексагональные структуры. Микромагнитные расчеты были проведены для образцов с длиной сегментов никеля и меди соответственно 140 и 15 нм («длинные» сегменты), а также для нанонитей, имеющих сегменты одинаковой длины, составившей 10 нм («короткие» сегменты).

Было установлено, что все сегменты, в целом, намагничены однородно. При этом магнитные моменты коротких сегментов упорядочиваются антиферромагнитно в плоскости перпендикулярной осям нитей. Увеличение размеров системы практически не влияет на характер упорядочения и вид кривых гистерезиса. В то же время магнитные моменты длинных сегментов располагаются ферромагнитно вдоль осей нитей. Размер системы оказывает существенное влияние на характер перемагничивания нитей. Данные экспериментов по SQUID магнитометрии были сопоставлены с результатами расчетов.

Расчеты были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ» (<http://www.cc.spbu.ru/>). Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 18-72-00011.

1. O. Fruchart et al., Handbook of Magnetic Materials, 27, 155–267 (2018).
2. P. Sergelius et al., Nanotechnology, 28(6), 065709 (2017).

Исследование ферромагнитных инвертированных опалов методами SQUID-магнитометрии и магнитно-силовой микроскопии во внешнем поле

И. С. Дубицкий¹, А. А. Мистонов^{1, 2}, А. В. Сыромятников^{1, 2},
Н. А. Григорьева², С. В. Григорьев^{1, 2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время активно развиваются методы синтеза и исследования магнитных свойств трехмерных ферромагнитных наноструктур [1]. Данные системы могут быть использованы для создания принципиально новых устройств хранения и передачи информации. Кроме того, многие из них проявляют необычные магнитные свойства. В частности, распределение локальной намагниченности в инвертированных опалах (ИО) на основе ферромагнетиков может быть описано при помощи так называемого правила спинового льда [2], впервые сформулированного для магнетиков со структурой пирохлора $Du_2Ti_2O_7$ и $Ho_2Ti_2O_7$ [3]. Справедливость правила спинового льда в ИО должна приводить к возникновению перпендикулярной магнитному полю компоненты намагниченности при приложении поля вдоль определенного направления мезоструктуры ИО. Настоящая работа посвящена исследованию данного эффекта методами SQUID-магнитометрии и магнитно-силовой микроскопии (МСМ). Результаты экспериментов были интерпретированы с помощью микромагнитного моделирования.

ИО были получены из коллоидных кристаллов посредством осаждения никеля в пустоты между микросферами, составляющими коллоидный кристалл. Образцы имели ГЦК структуру с постоянной решетки, составляющей 700 нм. При проведении экспериментов по SQUID-магнитометрии регистрировался продольной и поперечной полю магнитный момент образца. МСМ исследования были выполнены во внешнем поле, приложенном вдоль направления [1-21] ГЦК структуры в плоскости образца.

Микромагнитное моделирование распределения намагниченности в элементарной ячейке позволило интерпретировать полевую зависимость перпендикулярной полю компоненты намагниченности и подтвердить справедливость правила спинового льда в ИО. На основании сопоставления вычисленного и измеренного в экспериментах по МСМ фазового контраста был предложен сценарий перемагничивания ИО во внешнем поле.

Расчеты были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ» (<http://www.cc.spbu.ru/>).

1. A. Fernández-Pacheco et al., Nature Communications, 8, 15756 (2017).
2. I.S. Dubitskiy et al., 441, 609–619 (2017).
3. C. Nisoli et al., 85(4), 1473 (2013).

Исследование влияния ионизирующего излучения на структурные характеристики Ni наноструктур

А. В. Дудко¹, А. Л. Козловский^{1,2}

¹ *Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

² *Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан*

В работе представлены результаты изменения структурных и проводящих свойств Ni наноструктур от типа иона и флюенса облучения. В качестве бомбардирующих пучков использовались ионы B^{2+} , Ca^{5+} , Fe^{7+} . Флюенс облучения составил 10^{10} , 10^{11} и 5×10^{11} ион/см². Установлено, что у образцов, облученных ионами B^{2+} и Ca^{5+} , основные структурные изменения связаны с аморфизацией или переориентацией текстуры, а для образцов облученных ионами Fe^{7+} наблюдается формирование мало интенсивных пиков характерных для соединения FeNi. Установлено, что увеличение степени кристалличности свидетельствует о положительном влиянии ионов кальция на кристаллическую структуру, которое заключается в частичном отжиге дефектов и снятии напряжений и искажений в кристаллической решетке. Незначительное снижение степени кристалличности при облучении ионами железа, может быть объяснено процессами имплантации и выбивания атомов никеля из узлов решетки, что приводит к формированию примесных включений в виде фазы FeNi, содержание которой увеличивается с флюенсом облучения. Формирование в структуре аморфных включений и частичного разрушения стенок нанотрубок под действием облучения ионами бора приводит к резкому снижению степени кристалличности и проводящих свойств нанотрубок.

Локальная атомная структура наночастиц золота в силикатных стеклах на основе DFT-моделирования

*В. А. Дурьманов¹, В. В. Срабионян¹, С. Ю. Каптелинин¹, Л. А. Авакян¹,
Г. Б. Сухарина¹, М. Heinz², М. Dubiel², Л. А. Бугаев¹*

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

² Martin-Universität Halle-Wittenberg, Institute of Physics, Saale, Germany

Золотые наночастицы в стеклянных матрицах представляют большой интерес, так как обладают многообещающими оптическими свойствами, обусловленные наличием поверхностного плазмонного резонанса. Основной целью данного исследования является получение золотых наночастиц с контролируемыми оптическими свойствами, которые могут быть изменены по средствам выбора технологии синтеза и постобработки [1, 2]. Одним из предложенных методов является термическая обработка при температуре 300 °С.

В данной работе представлены результаты исследования влияния термической обработки на локальную атомную структуру наночастиц золота в стеклянной матрице на основе теории функционала плотности. Полученные результаты DFT моделирования подтвердили обоснованность данных EXAFS анализа экспериментальных спектров и позволили определить наиболее вероятные модели локальной атомной структуры золотых наночастиц в силикатных стеклах.

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00818 мол_а.

1. M. Dubiel, M. Heinz et al., Generation and characterization of plasmonic nanostructures in glass surfaces by means of excimer and solid state laser irradiation, International Society for Optics and Photonics, Volume 9163, August 2014, p. 91631M.
2. M. Heinz et al. / Journal of Alloys and Compounds 681 (2016) 307–315.

Организация и динамика коллоидных наночастиц гексаферрита под воздействием магнитного поля

А. А. Елисеев, А. В. Васильев, Е. А. Горбачев, А. Е. Слепцова

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. В последнее время значительно возрос интерес к наночастицам гексаферрита, что вызвано несколькими уникальными свойствами: анизотропная пластинчатая форма и значительный остаточный магнитный момент вдоль оси с. Подобный набор свойств обеспечивает ряд перспективных применений материала: устройства записи высокой плотности, наноструктуры и композиты, использование в медицинских целях. Однако, множество технологических процессов и медицинских областей требует на определенных этапах нахождения наночастиц во взвешенном, коллоидном состоянии. Формирование коллоидного раствора из частиц с высоким магнитным моментом является сложной задачей ввиду дополнения стандартного набора сил, действующих на частицу магнитным диполь-дипольным взаимодействием. Помимо агрегации влияние магнитного поля частиц может выражаться в самоорганизации частиц в коллоидном растворе, в том числе ввиду воздействия внешнего магнитного поля.

Таким образом, целью настоящей работы является изучение структурирования и самоорганизации протекающих в коллоидных растворах на основе гексаферрита под воздействием внешнего магнитного поля.

Синтез коллоидных растворов осуществлялся в соответствии с ранее разработанной методикой растворения боратной стеклокерамики [1]. Структура раствора и динамика частиц дисперсной фазы были исследованы на основании магнитооптического отклика системы, данных малоуглового рентгеновского рассеяния и магнитометрии в постоянных и переменных полях. Показана возможность управления ориентацией частиц в объеме раствора и модуляции оптического сигнала до частоты 5 кГц [2]. Дифракционными методами установлено образование нитевидных динамических агрегатов в дисперсных системах высокой концентрации со средним расстоянием между наночастицами гексаферрита около 30 нм.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-33-00765.

1. L.A. Trusov, A.V. Vasiliev, M.R. Lukatskaya, D.D. Zaytsev, M. Jansen, P.E. Kazin, Chem. Commun. 50 (2014) 14581–14584.
2. A.A. Eliseev, A.A. Eliseev, L.A. Trusov, A.P. Chumakov, P. Boesecke, E.O. Anokhin, A.V. Vasiliev, A.E. Sleptsova, E.A. Gorbachev, V.V. Korolev, P.E. Kazin, Appl. Phys. Lett. 113 (2018) 113106.

Исследование магнитных свойств массивов нанонитей на основе железа методом FORC

А. Елмекави¹, С. В. Сотничук², К. С. Напольский², Д. Менцель³, А. А. Мистонов¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Институт физики конденсированного состояния, Брауншвайг, Германия

Магнитные массивы нанонитей (ММН) до недавнего времени рассматривались в качестве кандидатов в материалы для магнитной записи с высокой плотностью. В качестве бита информации выступает намагниченность одной нанонити.

Однако существенными препятствиями для корректной записи и считывания информации являются сильные поля размагничивания, создаваемые длинными, но узкими намагниченными нанонитями, и прерывистый процесс перемагничивания отдельной нанонити [1, 2] из-за пиннинга доменной стенки на неоднородностях структуры. Магнитостатические взаимодействия между нанонитями часто приводят к дальнейшему усложнению процесса перемагничивания [3].

Для решения второй проблемы необходимо использовать материал с низкой анизотропией кристаллической решетки (например, кубической), но обладающий достаточно высоким магнитным моментом. Отличным материалом для этих целей является железо.

В данной работе исследуются ММН на основе железа, синтезированные методом темплатного электроосаждения. В качестве темплатов использовали пористые пленки анодного оксида алюминия (АОА) толщиной 35 мкм, полученные с помощью двухстадийного анодирования алюминия. Электроосаждение железа проводили при комнатной температуре в трехэлектродной ячейке. В данной работе были исследованы 2 серии ММН. В первой серии нанонити имеют одинаковый диаметр 30 ± 3 нм и различаются расстоянием между ними (63 ± 5 , 100 ± 4 нм), во второй расстояние фиксировано (100 ± 4 нм) и варьируется диаметр (30 ± 3 , 49 ± 3 , 70 ± 3 нм). Длина нитей составляла 400 нм и 35 мкм.

Исследование магнитных свойств ММН проводилось методом first-order reverse curves (FORC). Этот метод позволяет получить распределения коэрцитивных полей и характерных полей магнитного взаимодействия. Поле прикладывалось как вдоль, так и поперек длинной оси нанонитей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-72-00011).

1. Vázquez M., Vivas L.G., Physica status solidi (b), 248(10), 2368–2381 (2011).
2. Ivanov Y. et al., Journal of Physics D: Applied Physics, 46(48), 485001 (2013).
3. Zighem F. et al., Journal of Applied Physics, 109(1), 013910 (2011).

Фазовый состав полтитанатов калия, модифицированных хромом, термообработанных на воздухе и в атмосфере аргона

*К. Р. Ерагер¹, Д. В. Попова², М. А. Викулова², С. И. Саунина¹,
Е. В. Третьяченко², А. В. Гороховский², Ш. Ш. Ягафаров¹*

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина,
Саратов, Россия

Известно, что слоистые частицы титанатов калия обладают высокой способностью к интеркаляции, что в свою очередь дает возможность получать продукты различные по своему химическому составу. Изменение парциального давления кислорода при синтезе материалов может приводить к изменению электропроводности, типа проводимости, коэффициента термического расширения, способствовать фазообразованию или тормозить его.

Методами рентгенофазового анализа с применением программного обеспечения «EVA» и картотеки PDF-2 и термогравиметрии изучено влияние среды на фазовый состав полтитаната калия, полученного в водных растворах нитрата хрома (III) при различных значениях водородного показателя ($\text{pH} = 7, 9$) и термообработанного при температуре $1100\text{ }^\circ\text{C}$ на воздухе и в аргоне.

На рентгенограммах образца с $\text{pH} = 7$ после термообработки на воздухе и в аргоне присутствуют фазы TiO_2 модификации анатаз, рутил и $\text{KTi}_8\text{O}_{16,5}$.

При увеличении значения модифицирующего раствора до $\text{pH} = 9$ формируются фазы $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ и $\text{KTi}_8\text{O}_{16,5}$ на воздухе и в среде аргона.

По данным термогравиметрии количество экзо- и эндо эффектов, связанных с превращениями, протекающими в образцах при нагревании на воздухе и в аргоне до температуры $1100\text{ }^\circ\text{C}$, идентично. Вместе с тем, при термообработке в аргоне образца $\text{pH} = 9$ начало экзоэффектов сдвигается в область более высоких температур и имеет более широкий температурный интервал. Эндотермический эффект, связанный с процессами разложения оксидов, смещается в сторону меньших температур. Температурный сдвиг экзо- и эндоэффектов, по-видимому, обусловлен различием парциального давления кислорода в процессе термообработки на воздухе и в аргоне.

Возможно, в образцах с $\text{pH} = 7, 9$ недостаток кислорода в среде аргона компенсируется кислородом, выделяющимся при восстановлении оксидов хрома в области температур $\sim 900\text{ }^\circ\text{C}$. Явно выраженного различия в фазовом составе модифицированного ПТК ($\text{pH} = 7, 9$), термообработанного на воздухе и в аргоне при $T = 1100\text{ }^\circ\text{C}$, не наблюдается.

Ультрапористый оксигидроксид алюминия, сочетающий супергидрофобные и люминесцентные свойства

Х. Э. Ёров¹, А. Е. Баранчиков², А. Н. Ходан³, Г. П. Копица^{4, 5}, В. К. Иванов^{2, 6}

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

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

³ *Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

⁴ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

⁵ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

Окисление металлического алюминия на воздухе в присутствии ртути, приводящее к образованию оксидных фаз и быстрому разрушению алюминиевых изделий, известно уже более 100 лет. Продуктом такого окисления является наноструктурированный оксигидроксид алюминия, характеризующийся волокнистой структурой и крайне низкой плотностью (~ 0.013 г/см³), что позволяет отнести его к аэрогелям (АГ) на основе одномерных структур. В последние годы активно проводятся исследования гибридных АГ и значительный интерес вызывает возможность получения АГ, модифицированных координационными соединениями металлов, придающими им дополнительную функциональность.

Целью настоящей работы является разработка методов получения аэрогелей Al_2O_3 , полученных контролируемым окислением алюминия через слой амальгамы, модифицированных трис(8-оксихинолилат)ом алюминия.

Исходные АГ Al_2O_3 были получены по стандартной методике. Модификация АГ была проведена путем их выдерживания в парах 8-оксихинолина при 60 °С в течение 5–7 дней. Также в ходе работы была проведена модификация Al_2O_3 , полученного отжигом исходных АГ при температурах до 1150 °С. Методами рентгенофазового, термического анализа, низкотемпературной адсорбции азота, электронной микроскопии, малоуглового рассеяния нейтронов, измерением контактного угла смачивания, гелиевой пикнометрии, ИК- и люминесцентной спектроскопии проведены комплексные исследования образцов АГ. Обработка как исходных, так и отожженных до 900 °С образцов приводит к получению гидрофобных и супергидрофобных АГ (контактный угол смачивания водой до 150°). Установлено, что структура как исходных, так и модифицированных АГ может быть описана в рамках трехуровневой модели, включающей в себя наличие первичных неоднородностей, формирующих анизодиаметричные объекты, которые, в свою очередь, объединены в крупномасштабные агрегаты. Показано, что высокая удельная площадь поверхности (~ 200 м²/г), характерная для исходных АГ, сохраняется при их термическом отжиге до 900 °С и незначительно меняется при модифицировании. Модифицированные аэрогели показали интенсивную люминесценцию с максимумом $\lambda_{em} \sim 550$ нм при длине волны возбуждения $\lambda_{ex} = 300$ нм.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (17-53-150007).

Структура тонких пленок на основе широкозонных полупроводников $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$

О. В. Жилова, В. А. Макагонов, С. Ю. Панков

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

В настоящее время одним из наиболее востребованных среди металлооксидных полупроводников является оксид индия, легированный оловом (ITO). Такой материал используется в качестве прозрачных электродов жидкокристаллических и сенсорных экранов, в солнечных элементах, для теплозащиты и защиты от электростатических разрядов и др. [1]. Электрические и оптические свойства ITO существенным образом зависят от структурного состояния. Поэтому в данной работе рассмотрено экспериментальное исследование структуры многослойных пленок системы $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$, полученных при послойном осаждении методом ионно-лучевого распыления керамических мишеней In_2O_3 и SnO_2 в атмосфере аргона на вращающуюся подложку. Толщина бислоя таких структур изменялась от 1,75 до 4,91 нм.

Анализ дифрактограмм тонких пленок In_2O_3 и SnO_2 , показал, что пленки SnO_2 имеют аморфную структуру, а пленки In_2O_3 являются нанокристаллическими.

На картине рентгеновской дифракция тонких пленок $\text{SnO}_2/\text{In}_2\text{O}_3$ в области углов $2\Theta = 10 - 60^\circ$ имеется один широкий максимум (гало). Положение дифракционного максимума не зависит от толщины пленки (толщины слоев) и хорошо согласуется с дифрактограммой от аморфной пленки SnO_2 и положением пиков наиболее интенсивной дифракции кристаллической пленки In_2O_3 кубической сингонии. Таким образом, в системе $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$ слои In_2O_3 так же, как и слои SnO_2 , имеют рентгеноаморфную структуру, тогда как структура отдельно напыленных тонких пленок оксида индия нанокристаллическая.

Анализ картин дифракции рентгеновских лучей в области малых брегговских углов ($2\Theta < 9^\circ$) показал, что для всех полученных значений эквивалентной толщины бислоя в тонких пленках $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SnO}_2$ формируется слоистая структура, что проявляется в виде максимумов на зависимостях $I(2\Theta)$. Сделанные выводы подтверждаются исследованиями ПЭМ поперечного сечения полученных образцов.

Работа выполнена в рамках проектной части государственного задания № 3.1867.2017/4.6.

1. V.V. Rylkov, S.N. Nikolaev et al., Physical review B. 144202-(1-12), 95 (2017).

Влияние химической предыстории на структуру и фотолюминесцентные свойства наночастиц $\text{TiO}_2:\text{Eu}^{3+}$

А. Ю. Завьялова^{1,2}, А. Н. Бугров^{2,3}, Р. Ю. Смыслов^{3,4}, Г. П. Копица^{4,5}

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

³ Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

⁵ Институт химии силикатов им. И. В. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Введение ионов металлов в кристаллическую решетку TiO_2 меняет его зонную структуру, что приводит к уменьшению запрещенной зоны и более эффективному поглощению на границе ближнего ультрафиолета и видимого света. Поэтому наноразмерный TiO_2 , легированный ионами редких земель, перспективен в качестве полупроводникового фотолюминесцентного материала.

В этой работе наночастицы $\text{TiO}_2:\text{Eu}^{3+}$ с содержанием ионов европия 2, 5, 7 и 10 мол.% были получены методами сольво- и гидротермального синтеза. В качестве исходных реагентов были выбраны $\text{Ti}(\text{OC}_4\text{H}_9)_4$ и $\text{Eu}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$, а также TiCl_4 и $\text{EuCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Наночастицы (НЧ), образовавшиеся из металлорганических и неорганических прекурсоров в условиях сольво- и гидротермального синтеза, были представлены исключительно структурой анатаза. Образцы состава $\text{TiO}_2:2 \text{ мол.}\% \text{ Eu}^{3+}$, полученные в кислой среде, представляли собой смеси двух полиморфных кристаллических модификаций в соотношении рутил : анатаз = 70%:30%. Средние размеры кристаллитов, рассчитанные по ширине дифракционных максимумов, составили 15 ± 2 и 20 ± 2 нм для порошков НЧ со структурой анатаза, полученных из металлорганических соединений методами сольво- и гидротермального синтеза соответственно. При гидротермальной обработке гидроксидов титана и европия, предварительно соосажденных из растворов их хлоридов, средний размер формирующихся ОКР снизился до 13 ± 2 нм. Размер и форму НЧ подтверждали с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Длина наностержней рутильной модификации по данным ПЭМ составила 70 ± 7 нм, ширина – 30 ± 3 нм.

Спектры возбуждения люминесценции регистрировали при 612, 614 и 616 нм. Показано, что для матрицы TiO_2 есть эффективный перенос энергии электронного возбуждения на ионы Eu^{3+} в видимой области длин волн возбуждения от 390 до 550 нм. Данные люминесценции подтверждают наличие основных спектральных термов, соответствующих $^5\text{D}_0-^7\text{F}_J$ ($J = 1-4$) электронным переходам ионов Eu^{3+} в видимой области спектра.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-33-60227.

Получение кристаллов водорастворимых солей кобальта и никеля

О. Б. Зайнуллин, В. А. Коморников, И. С. Тимаков

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

В современном приборостроении оптические фильтры являются важной составляющей. В Институте кристаллографии разрабатываются методики выращивания кристаллов с узкой полосой оптического пропускания в различных областях оптического спектра.

Фильтры с узкой полосой пропускания в УФ диапазоне применяют в приборах «солнечно-слепой технологии» [1]. Данные работы ведутся с использованием двойных сульфатов переходных элементов, так называемых солей Туттона [2]. При этом оптические фильтры, полученные из кристаллов данных веществ, имеют оптическую область пропускания в видимой зоне, что негативно сказывается на технических характеристиках, произведенных с их использованием приборов.

Настоящая работа посвящена определению условий получения кристаллов водорастворимых солей кобальта и никеля с необходимыми спектральными характеристиками. Хлориды кобальта и никеля привлекают внимание схожими оптическими свойствами и перспективами увеличения температурного диапазона эксплуатации.

В работе исследованы фазовые равновесия водно-солевых систем $\text{NiCl}_2\text{-CoCl}_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2\text{-HCl-H}_2\text{O}$, определены области кристаллизации твердых растворов. Исследованы оптические спектры пропускания растворов данных соединений с близкой к насыщенным растворам концентрацией.

Полученные результаты позволили оптимизировать условия получения кристаллических образцов соединений $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2\cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ni}_x\text{Co}_{(1-x)}\text{Cl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Полученные кристаллические образцы исследованы методами РФА, ДСК/ТГА, получены спектральные характеристики.

Данные, полученные в результате исследований, позволяют разработать методики выращивания крупных монокристаллов из водных растворов, пригодных для практического применения в оптике.

1. А. Э. Волошин, Е. Б. Руднева и др. Патент на изобретение RU 2417388 от 24.11.2006.
2. В. Л. Маноменова, Е. Б. Руднева и др. Кристаллография, 50, 937–942 (2005).

Магнитная структура наноструктурированных пленок и островковой структуры Ni-Fe

Т. И. Зубарь¹, А. В. Труханов¹, Д. И. Тишкевич¹, К. А. Астапович¹, С. А. Чижирик²

¹ ГО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь

² Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Тонкие пленки Ni-Fe широко используются в устройствах сенсорики и спинтроники благодаря оптимальному балансу магнитных и электрических свойств. Одновременно с этим наноразмерных магнитные частицы (островковые структуры) перспективны в развитии следующего поколения магниторезистивной оперативной памяти ультравысокой плотности и квантовых компьютеров. Это актуализирует задачи исследования магнитной структуры тонких пленок и отдельных наночастиц островкового типа на диамагнитной подложке. В настоящей работе обсуждаются результаты исследования магнитной структуры пленки и островковой структуры Ni-Fe на слое Au методом магнитносилового микроскопии (МСМ). Установлено, что наноструктурированная пленка с толщиной 3 нм включает одиночные магнитные домены с направлением магнитного момента перпендикулярно плоскости пленки, образованные в зернах с диаметром больше 10 нм. На удалении нескольких нанометров от зерна образуется компенсирующий домен с противоположным направлением магнитного момента. В областях пленки, где средний размер зерна ниже 10 нм наблюдается нулевой отклик магнитной пленки. Это связано с тем, что направления магнитных моментов параллельны плоскости пленки. При увеличении толщины наноструктурированной пленки сила магнитостатического взаимодействия и размер доменов увеличивается. Результаты МСМ также позволили установить, что изолированные частицы Ni-Fe со средним размером 50 нм на золоте имеют двухдоменную магнитную структуру с ориентацией магнитных моментов перпендикулярной пленке. Причем при увеличении плотности частиц от 50 до 150 мкм⁻¹ средний магнитный момент домена уменьшается от 25,9 до 13,3 отн. ед. Таким образом, увеличение плотности заполнения подложки магнитными частицами вызывает переориентацию направлений части магнитных моментов из перпендикулярных на параллельное плоскости пленки.

Влияние фрактальной размерности на разнообразие беспорядка и разномасштабного порядка при вариациях интенсивной деформации

*З. А. Самойленко¹, Н. Н. Иващенко^{1, 2}, Е. И. Пушенко¹,
Е. Г. Пашинская¹, М. Ю. Бадекин^{1, 2}*

¹ *Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, Донецк*

² *Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, Донецк*

В работе выполнен количественный фрактальный анализ границ зерен микроструктуры медных образцов после воздействия на последних интенсивной деформации путем прокатки со сдвигом. В качестве оценки значений фрактальной размерности границ зерен исследуемых объектов применялся так называемый класс box-computing который существенно упрощает задачу вычисления размерности Хаусдорфа. В результате исследований было обнаружено, что обработка позволила улучшить прочностные характеристики более, чем на 30 % при одновременно росте пластических более чем на 15 % по сравнению с общепринятой технологией прокатки. Установлены корреляционные связи фрактальной размерности границ зерен с максимальной нагрузкой на волки, пределом текучести, пределом прочности, величиной относительного удлинения, запасом пластичности. Значения корреляционных коэффициентов свидетельствуют о почти функциональной связи вышеуказанных макроскопических параметров с оценочными значениями фрактальной размерности. Оказывается, что в структурно модифицированном образце методом интенсивной пластической деформации путем прокатки со сдвигом, создаются хорошие условия, для образования комплекса мелкокристаллических (37 %) и кластерных (13 %) групп разного масштаба атомного порядка (50 %) в беспорядке (50 %).

1. Е. Г. Пашинская. Физико-механические основы измельчения структуры при комбинированной пластической деформации. Вебер, Донецк (2009). 352 с.
2. Е. Pashinska, V. Varyukhin, A. Zavdoveev, V. Stolyarov. Emerg. Mater. Res. 1, 121–126 (2012).
3. Е. Г. Пашинская, А. А. Толпа, М. М. Мышляев, В. В. Гришаев, А. В. Завдоев. Металлы 6, 25–31 (2011).

Золь-гель синтез оксинитридов кремния и алюминия, легированных редкоземельными элементами

С. Н. Ивичева, Н. А. Овсянников, А. С. Лысенков, Ю. Ф. Каргин

Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия

Оксинитриды кремния и алюминия, допированные РЗЭ, являются перспективными материалами для применения в светодиодных источниках белого света и твердотельных детекторов излучений [1–3]. Актуальной задачей является развитие способов синтеза высокочистых оксинитридов кремния и алюминия (ALON и SiALON) с РЗЭ.

Золь-гель методы синтеза оксинитридных материалов позволяют получать высокочистые и высокодисперсные порошки с равномерным введением и распределением спекающих и легирующих добавок, включая РЗЭ. Ранее исследовались особенности синтеза сиалона и алона номинальных составов $\text{Si}_3\text{Al}_3\text{O}_3\text{N}_5$ и $\text{Al}_5\text{O}_6\text{N}$ обжигом и горячим прессованием при 1600–1750 °С в атмосфере азота с использованием в качестве исходных компонентов нитрида кремния или нитрида алюминия и смеси нитридов кремния и алюминия с нанесением соответствующего оксида кремния или алюминия золь-гель методом [4–6].

В настоящей работе исследована возможность получения высокочистого β -SiALON и ALON, допированных европием азотированием смешанных золь, приготовленных на основе алкоколятов кремния и алюминия без введения соответствующих нитридов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта, проект № 17-03-00630.

1. N.C. George, K.A. Denault, R. Seshadri. Phosphors for Solid-State White Lighting. Annual Review of Materials Research, 2013, 43, 481–501.
2. R. Xie, Bert Hintzen, T. Hubertus. Optical Properties of (Oxy)Nitride Materials: A Review, J. Am. Ceram. Soc. 2013, 96, 665–687.
3. N.S. Akhmadullina, A.S. Lysenkov, A.A. Ashmarin, A.E. Baranchikov, A.V. Ishchenko, V.V. Yagodin, B.V. Shulgin, Yu.F. Kargin. Synthesis and luminescence properties of Eu^{2+} and Ce^{3+} - doped ALONs // Ceramics International, 2016, 42, 286–293.
5. S.N. Ivicheva, A.S. Lysenkov, N.A. Ovsyannikov, D.D. Titov and Yu.F. Kargin. Features of the phase composition and morphology of the particles of sialon synthesized from silicon and aluminum nitrides // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2018. V. 347. 012046. doi:10.1088/1757-899X/347/1/012046.
6. Ягодин В. В., Байбалова Г. Ф., Ищенко А. В., Ивичева С. Н., Лысенков А. С., Каргин Ю. Ф., Шульгин Б. В. Импульсная катодолюминесценция оксинитрида алюминия $\text{Al}_5\text{O}_6\text{N}$, активированного редкоземельными ионами // Проблемы спектроскопии и спектрометрии, 2018. Вып. 39. С.110–113.

Моделирование структурных и дисперсных характеристик нанокомпозитов на основе опаловых матриц по данным МУРН и МУРР

С. Н. Ивичева¹, С. В. Амарантов², Ю. Ф. Каргин¹, В. В. Волков²

¹ *Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия*

² *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

Задача экспериментов МУРН и МУРР заключалась в сравнительном определении по измеряемому дифференциальному сечению рассеяния распределение ядерной (или электронной) плотности длин рассеяния внутри неоднородностей исходной ОМ и нанокомпозитов разного состава на основе одинаковых ОМ в зависимости от порядка заполнения структурных пустот. Подразумевалось, что сравнительные экспериментальные данные МУР позволят определить общие характеристические параметры для трехмерных опалоподобных композитов, выявить по одномерным кривым МУР возможные корреляции между структурными неоднородностями (размер, предположительно расположение и др.), поскольку во всех исследованных образцах изменяется только один структурный параметр – заполнение порового пространства ПШУ опаловой матрицы различными веществами без нарушения геометрии.

Анализ данных МУРН в диапазоне углов соизмеримых с параметрами упорядоченной структуры ОМ показал, что все исследуемые композитные образцы представляют собой упорядоченные структуры с одинаковыми параметрами ГЦК решетки, обусловленной исходной ОМ [1]. Порядок заполнения пустот ОМ кристаллическими (отличающимися от исходной ОМ по составу, плотности и др. параметрам) или аморфными (близкими по фазовому составу к ОМ) веществами определяет структурный тип ГЦК решетки композита и селективность проявления тех или иных дифракционных рефлексов или $\{hkl\}$ плоскостей, что отражается на одномерных кривых МУРН в области ультрамалых углов после вычитания кривой малоуглового рассеяния, как диффузионного фона.

В зависимости от доступного углового диапазона МУР обработка данных для упорядоченных композитов разного состава может быть осуществлена разными модельными представлениями: с позиций фрактальных структур, и с позиций полидисперсных систем. Полученные сравнительные результаты могут быть полезны для интерпретации экспериментальных данных МУР для упорядоченных 3D-опалоподобных материалов любого состава.

1. Ивичева С. Н., Амарантов С. В., Каргин Ю. Ф., Волков В. В. // Российские нанотехнологии. 2018. Т. 13. № 7–8. С. 10–17.

Исследование кристаллов КТР с примесями, получаемых flux-методом

Е. А. Исупова, В. А. Иванов, П. В. Андреев, М. А. Фаддеев

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

Кристаллы КТР выращивались из раствора в расплаве (flux-метод) методом спонтанной кристаллизации. Исходный состав шихты содержал (в мол.%): 42 K₂O, 14 P₂O₅, 14 TiO₂, 30 WO₃ [1]. Примесь ZrO₂, HfO₂ или Nb₂O₅ замещала часть TiO₂ так, что их сумма оставалась равной 14 мол. %. Чистые кристаллы КТР выращивались при различном соотношении K₂O/P₂O₅ в шихте как при наличии 30 мол. % WO₃, так и без него. Выращенные кристаллы отмывались в горячей воде от незакристаллизовавшихся остатков раствор-расплава.

Были получены ряды кристаллов KTi_{1-x}Me_xOPO₄, (Me – Hf, Zr, Nb) с концентрацией примесей в шихте в интервале $0 < x < 0.3$, а также чистые кристаллы КТР (более 40 образцов). Полученные образцы кристаллов перетирались в порошок в агатовой ступке.

Для идентификации выращенных фаз проводился рентгеновский фазовый анализ на дифрактометре Shimadzu XRD-7000, Cu-K α . Все образцы однофазные, близкие по структуре к чистому КТР (PDF № 00-035-0802). Объем элементарной ячейки возрастает с увеличением доли замещения атомов Ti атомами примесей, следовательно, примеси встраиваются в структуру кристаллов.

Для определения относительного содержания титана и примеси в выращенных кристаллах проводился элементный анализ на рентгенофлуоресцентном спектрометре ShimadzuLabCenter XRF-1800 и на атомно-эмиссионном спектрометре ProdigyHighDispersion ICP. Оба метода элементного анализ дали результаты, совпадающие в пределах погрешностей. Рассчитан коэффициент распределения примесей по линейным участкам зависимостей их концентрации в кристалле от концентрации в шихте. Среднее значение для Zr составляет 1.64 ± 0.11 , Hf 2.37 ± 0.11 , Nb 0.43 ± 0.05 .

Проведено исследование нелинейно-оптических свойств данных серий кристаллических образцов.

1. D.P. Shumov et al., Cryst. Res. Tech. 25(11), 1245–1250 (1990).

Образование и рост наночастиц палладия в металл-органической каркасной структуре UiO-67 по данным *in situ* спектроскопии рентгеновского поглощения

Е. Г. Камышова¹, А. Л. Бугаев¹, А. А. Скорынина¹,
А. В. Солдатов¹, К. Ламберти²

¹ *Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

² *Физический факультет Туринского университета, Турин, Италия*

Металл-органические каркасные структуры (МОК) – перспективные материалы, которые представляют собой совершенно новый класс пористых кристаллов [1]. МОК состоят из металлоцентров, связанных органическими линкерами в трехмерные структуры. Дополнительные полезные свойства, в том числе каталитические, могут быть получены путем функционализации МОК благородными металлами. Одним из наиболее перспективных МОК является семейство UiO-66/67/68, которое демонстрирует невероятно высокую механическую, термическую и химическую стабильность.

В этой работе мы исследуем формирование и рост наночастиц палладия в структуре UiO-67, которая сочетает в себе высокую каталитическую активность палладия с уникальными свойствами носителя (UiO-67) [2]. Синтезированные материалы были исследованы в Европейском центре синхротронного излучения ESRF методом спектроскопии рентгеновского поглощения в протяженной области (EXAFS) в режиме *in situ*.

Мы произвели одновременный Фурье-анализ для всей серии спектров, измеренных в ходе восстановления образца в водороде, что позволило получить детальную информацию о локальной геометрии вокруг атомов палладия [3]. Мы предложили подходящую модель для подгонки, которая дала отличное согласование с экспериментом, и получили несколько важных структурных результатов: температурный интервал разрушения связи Pd–Cl лежит в пределах от 200 до 300 °С, уменьшение относительного числа связей Pd–N начинается при более низких температурах, но охватывает более широкий температурный интервал по сравнению с Pd–Cl. Формирование наночастиц палладия начинается после 200 °С, и дальнейшее нагревание в водороде выше 300 °С приводит к образованию более крупных частиц, которые больше не ограничены порами UiO-67.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-73-00189.

1. Butova V.V., Soldatov M.A., Guda A.A. et al. Metal-organic frameworks: structure, properties, methods of synthesis and characterization // Russian Chemical Reviews. 2016. V. 85. No. 3. P. 280–307.
2. Bugaev A.L., Guda A.A., Lomachenko K.A. et al. Operando study of palladium nanoparticles inside UiO-67 MOF for catalytic hydrogenation of hydrocarbons // Faraday Discussions. 2018. Sep 3. V. 208. P. 287–306.
3. Kamyshova E.G., Skorynina A.A., Bugaev A.L. et al. Formation and growth of Pd nanoparticles in UiO-67 MOF by *in situ* EXAFS // Radiation Physics and Chemistry. 2019. In press.

Исследование углеродно-азотных пленок на железе: химический состав и коррозионно-электрохимические свойства

*Т. С. Картапова¹, О. Р. Бакиева¹, В. Л. Воробьев¹, Ф. З. Гильмутдинов¹,
Е. М. Борисова², С. М. Решетников²*

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия*

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Ранее нами было показано, что углеродные, углеродно-азотные CN_x пленки и ионно-азотированные слои на поверхности армко-железа в целом обладают защитными свойствами в агрессивных средах. Также было показано, что, несмотря на некоторую общность в химическом состоянии и концентрации азота, внедренного в углеродные слои, пленки, полученные магнетронным распылением в среде смеси «аргон – азот» обладают худшими свойствами, по сравнению с покрытиями, полученными магнетронным напылением в среде аргона с последующей имплантацией ионов азота. Существенным отличием во втором случае является дополнительное разупорядочение всей пленки и формирование переходного слоя переменного состава, состоящего из нестехиометрических соединений карбонитридов с проникновением азота глубже границы раздела «пленка/железо».

В данной работе методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии исследован химический состав поверхностных покрытий толщиной 8 нм и 15–20 нм, полученных магнетронным распылением углерода с последующей ионной имплантацией азота на поверхности армко-железа. Проведенные электрохимические испытания и полученные по их результатам потенциодинамические кривые в нейтральном боратно-буферном растворе, в децимолярных растворах щелочи и кислоты в условиях естественной аэрации демонстрируют снижение плотности анодных токов как в области условно активного растворения, так и в пассивной области потенциалов. Полученные данные позволяют предполагать, что пассивное состояние обработанных образцов железа связано не только с традиционно предполагаемыми процессами адсорбции кислорода или гидроксид-ионов, нестехиометрических оксидов железа, но и с образованием в поверхностном слое нитридов, оксинитридов, карбидов, оксикарбидов или оксикарбонитридов железа.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 16-43-180765.

Влияние изотермических отжигов на оптические свойства кристаллов $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$

В. М. Касимова¹, Н. С. Козлова¹, О. А. Бузанов², А. П. Козлова¹

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

² *ОАО «Фомос-Материалс», Москва, Россия*

Синтезированный и выращенный в 2011 году в Японии [1] монокристалл $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ (GAGG:Ce) относится к перспективным функциональным материалам для преобразования энергии высокоэнергетических частиц в видимый свет и обладает рядом уникальных свойств. Кристалл является негигроскопичным, химически стабильным материалом с высокой плотностью ($6,63 \text{ г/см}^3$), обладающим наиболее высоким световыходом среди кислород содержащих сцинтилляторов $(40 - 60) \times 10^3$ фотон/МэВ, прозрачностью к собственному излучению, высокой радиационной стойкостью [2, 3]. Данные свойства отвечают требованиям для детектирующих элементов в позитронно-эмиссионной томографии [4].

Немаловажной характеристикой кристалла являются его оптические свойства и в том числе в зависимости от послеростовых обработок. В работе исследовались кристаллы GAGG:Ce, выращенные методом Чохральского в компании ОАО «Фомос-Материалс». Спектрофотометрическими методами исследованы оптические параметры: коэффициенты пропускания и отражения, показатели поглощения и преломления.

Спектральные зависимости GAGG:Ce представляют собой немонотонные зависимости с характерными полосами поглощения с максимумами $\lambda \approx 440 \text{ нм}$, $\lambda \approx 340 \text{ нм}$, $\lambda \approx (300 - 310) \text{ нм}$, $\lambda \approx 270 \text{ нм}$, $\lambda \approx 230 \text{ нм}$. Проведенная методом Таука оценка оптической ширины запрещенной зоны этих кристаллов показала величину $5,88 \pm 0,05 \text{ эВ}$.

Образцы были подвергнуты изотермическим отжигам при температурах $1250 \text{ }^\circ\text{C}$ и $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ в атмосферах кислорода и вакуума. Проведены исследования влияния изотермических отжигов на вышеупомянутые оптические параметры.

В данной работе приводятся результаты таких исследований.

1. K. Kamada, T. Yanagida et al., IEEE NSS/MIC. 1927(2011).
2. Physical and Scintillation Properties // Furukawa Co.
URL: <http://furukawa-denshi.co.jp/cgi-bin/pdfdata/20140428162950.pdf>
(дата обращения: 20.01.2019).
3. V. Alenkov, O. Buzanov et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 916, 226 (2019).
4. P. Lecoq, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 809, 130 (2016).

Стабильность многослойных структур ZnO/SnO₂ и ZnO/SiO₂ при термическом воздействии

М. А. Каширин, И. С. Ильяшев, В. А. Макагонов, С. Ю. Панков

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Многослойные оксидные гетероструктуры привлекают повышенный интерес для использования их в устройствах функциональной электроники [1]. В большинстве случаев эти системы демонстрируют улучшенные или новые физические свойства и могут объединять функциональные свойства двух разных материалов [1, 2].

В докладе рассматривается формирование и стабильность, а также электрические свойства аморфных систем на основе широкозонных полупроводников ZnO/SnO₂ и полупроводник-диэлектрик ZnO/SiO₂, полученных методом ионно-лучевого напыления путем послойного осаждения слоев.

Рентгеновская дифракция указывает на преобладание аморфной структуры пленок. Основную роль в этом, очевидно, играют слои SnO₂ и SiO₂, пленки которых при послойном осаждении являются аморфными и степень кристалличности не зависит от толщины слоев.

Термическое воздействие на структуру ZnO/SnO₂ приводит к кристаллизации, и как следствие перемешиванию границ раздела. С увеличением периода структуры (Λ) от 1,6 до 4,8 нанометров температура начала процесса кристаллизации понижается от 490 до 380 °С.

В системе ZnO/SiO₂ период многослойной структуры изменялся от $\Lambda = 8,7$ нм до $\Lambda = 9,5$ нм. Методами рентгеновской дифракции установлено, что в данной системе процесс кристаллизации в пленках не протекает вплоть до температур 600 °С. Были определены области когерентного рассеяния (размер кристаллитов) пленок ZnO/SiO₂. Среднее значение составляет величину $5 \pm 0,5$ нм, то есть с уменьшением толщины периода многослойной структуры в указанном диапазоне изменение размера нанокристаллитов не наблюдается.

Электрические свойства данных систем определяются свойствами полупроводниковых слоев и рассеянием носителей заряда на интерфейсах оксидный полупроводник – SiO₂.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания (проект № 3.1867.2017/4.6).

1. S.-J. Lee, C.-S. Hwang, J.-E. Pi, J.-H. Yang, C.-W. Byun, H.Y. Chu, K.-I. Cho, and S.H. Cho, ETRI J. 37 (6), 1135–1142 (2015). doi: 10.4218/etrij.15.0114.0743.
2. F. Trier et al. 2018 J. Phys. D: Appl. Phys. 51 293002. doi: 10.1088/1361-6463/aac9aa.

**Синтез сегментированных нанонитей
с эффектом гигантского магнетосопротивления
при помощи роботизированного темплатного электроосаждения**

А. Д. Кобелев, С. Е. Кушнир, А. А. Клименко, С. В. Сотничук, К. С. Напольский

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Активное развитие спинтроники и интерес ученых по всему миру к данной области науки связан с большими перспективами практического применения необычных физических явлений, связанных со спином электрона, в элементах микроэлектроники. Материалы, в которых проявляются эффекты спинтроники, обычно представляют собой слоистые структуры, содержащие слои различной магнитной природы. В таких структурах проявляется один из важных эффектов спинтроники – эффект гигантского магнетосопротивления. Этот эффект удобно использовать в случае сегментированных нанонитей. В них функциональные слои различной природы чередуются вдоль длинной оси наноструктуры и появляется возможность управлять анизотропией формы отдельных сегментов, которая существенно влияет на свойства ферромагнитных слоев.

Целью настоящей работы является разработка методики темплатного электроосаждения сегментированных металлических нанонитей в пористые матрицы с цилиндрическими каналами с использованием роботизированной системы смены электролита, позволяющей кулонометрически контролировать толщину сегментов и получать как монометаллические сегменты, так и сегменты более сложного состава (например, сплав Гейслера).

В качестве матриц при темплатном электроосаждении металлов использовали пористые пленки анодного оксида алюминия. При синтезе нанонитей особое внимание уделяли химической чистоте получаемых сегментов, поэтому каждый раз при смене электролита сборка из электродов (рабочий, вспомогательный и электрод сравнения) четырежды промывалась в деионизованной воде. Для зарождения фазы нового сегмента одновременно во всех порах темплата перед основным электроосаждением подавали импульс зарождения на 0,1 с. Для измерения магнетосопротивления электрический контакт на верхней поверхности темплата формировали путем электроосаждения меди на последней стадии синтеза до образования сплошной металлической пленки на поверхности темплата.

В результате были получены образцы сегментированных нанонитей, содержащих до 100 ферромагнитных (Ni, Co) сегментов различной длины, разделенных тонкой прослойкой меди, и определены значения их магнетосопротивления.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-3127.2018.3 (соглашение № 075-02-2018-823).

Выращивание и некоторые свойства кристалла гидрофосфитгуанилмочевины (GUNP)

*Н. Н. Козлова¹, А. А. Каминский¹, В. Л. Маноменова¹, Е. Б. Руднева¹,
Н. И. Сорокина¹, В. В. Гребенев¹, А. А. Ангелуц², И. А. Ожередов^{2, 3},
П. М. Солянкин^{2, 3}, И. Ю. Денисюк⁴, М. И. Фокина⁴, Н. А. Зулина⁴,
А. П. Шкуринов^{2, 3}, А. Э. Волошин¹*

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Физический факультет и Международный лазерный центр
МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

³ *Институт проблем лазерных информационных технологий РАН –
филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, Россия*

⁴ *Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время потребность в более эффективных материалах для хранения, передачи и обработки данных в нелинейной оптике привела к интенсивным исследованиям в данной области. Новый перспективный нелинейно-оптический кристалл гидрофосфитгуанилмочевины $(\text{NH}_2)_2\text{CNHCO}(\text{NH}_2)\text{H}_2\text{PO}_3$ (GUNP), который принадлежит к пространственной группе симметрии C_s , может быть успешно использован для нелинейно-оптического преобразования через генерацию второй и третьей оптических гармоник ИК-лазерного излучения [1–4], преобразования фемтосекундного излучения в терагерцовый диапазон частот. Полуорганический кристалл GUNP обладает высокой механической и лазерной прочностью, по величине порога лазерного разрушения он не уступает кристаллу LBO, а по эффективности нелинейно-оптического преобразования лазерного излучения превосходит широко известный кристалл KDP. Кристалл GUNP также может быть применен в физических, биологических и медицинских приборах (конфокальная микроскопия и эндоскопические приборы).

В настоящей работе получена температурная зависимость равновесной концентрации гидрофосфитгуанилмочевины в водных растворах. Исследовано изменение плотности водных растворов GUNP при изменении их концентрации.

Выращены кристаллы GUNP методами снижения температуры и при постоянной температуре в условиях перемешивания водных растворов и при отсутствии перемешивания. Исследована термическая стабильность выращенных кристаллов. Также были получены спектры поглощения и генерации в видимом и ближнем ИК диапазоне, спектр поглощения в терагерцовом диапазоне при комнатной температуре полученных монокристаллических образцов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

1. Kroupa J. // J. Opt. 2010. V. 12. 045706 (3 pp).
2. Kroupa J., Fridrichova M. // J. Opt. 2011. V. 13. 035204 (7 pp).
3. Fridrichova M., Kroupa J., Nemeц I. et al. // Phase Transitions. 2010. V. 83. No. 10–11. P. 761.
4. Kaminskii A.A., Becker P, Rhee H. et al. // Phys. Status Solidi. 2013. V. B 250. No. 9. P. 1837.

Исследование процессов дефектообразования в AlN в результате облучения ионами He²⁺

А. Л. Козловский^{1, 2}, Т. М. Гладких¹, М. В. Здоровец^{1, 2}

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

В работе представлены результаты проведенных исследований по изучению процессов дефектообразования, радиационной стойкости, изменения проводящих и изоляционных характеристик керамик AlN под действием облучения ионами He²⁺ с энергией 40 кэВ. Флюенс облучения составил от 10¹⁵ до 5x10¹⁷ ион/см². С применением метода рентгеноструктурного анализа установлено, что увеличение флюенса облучения приводит к снижению интенсивностей дифракционных пиков и изменению формы линий, что свидетельствует об увеличении концентрации искажений и напряжений в кристаллической структуре. Изменение концентрации деформации в структуре обусловлено увеличением содержания внедренного гелия и образованием каскадов вторичных дефектов и вакансий. При больших флюенсах облучения (выше 10¹⁷ ион/см²) на дифрактограммах наблюдается формирование гало, характерного для рентгеноаморфных или сильно разупорядоченных примесных включений и формированию в приповерхностном слое сферических включений, средний размер которых варьируется от 50 до 100 нм. Снижение сопротивления и теплопроводности в результате облучения и формирования гелиевых включений в структуре свидетельствует о деградации структурных характеристик, а также снижению радиационной стойкости, которое обусловлено падением прочностных характеристик.

Получение кристаллов-суперпротоновиков и функциональных композитных материалов на их основе

*В. А. Коморников, В. В. Гребенев, И. С. Тимаков, О. Б. Зайнуллин,
И. П. Макарова, Е. В. Селезнева*

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Протонообменные материалы являются перспективными для разных областей техники, наиболее важной из которых является водородная энергетика. Протонообменная мембрана является ключевым компонентом экологически чистого и безопасного водородно-воздушного топливного элемента. Следовательно, от параметров материала упомянутой мембраны напрямую зависит эффективность работы всего топливного элемента.

Перспективными для указанных применений материалами являются соединения семейства с общей формулой $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ ($M=K, Rb, Cs, NH_4$; $XO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4$). Одним из уникальных свойств кристаллов этого семейства, названного суперпротоновиками, является аномально высокая протонная проводимость при относительно невысокой температуре, проявляющаяся вследствие фазового перехода. Причем суперпротонная проводимость в них связана только со структурными особенностями данных соединений и не зависит от влажности, дефектов реальной структуры или влияния легирующих добавок.

На примере изучения фазовых равновесий в четырехкомпонентной водно-солевой системе $CsOH - H_2SO_4 - H_3PO_4 - H_2O$ и получении композитных материалов $xCs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4) - (1-x)AlPO_4$; $xCs_6(HSO_4)_3(H_2PO_4)_4 - (1-x)AlPO_4$ в работе показан полный цикл исследований от фундаментальных изысканий в области получения кристаллов-суперпротоновиков до прикладного получения функциональных композитных протонпроводящих материалов.

Для проведения испытаний функциональных возможностей синтезированных композитных материалов была спроектирована и создана оригинальная водородно-воздушная топливная ячейка. Проведенные испытания выявили принципиальную применимость как самих композиционных материалов, так и методики их получения для водородной энергетики.

Работа выполнена при поддержке Гранта 18-32-20050. Характеризация физико-химических свойств кристаллов проведена при поддержке Федерального агентства научных организаций (соглашение № 007-ГЗ/ЧЗ363/26). В работе использовано оборудование ЦКП ИК РАН (Минобрнауки, проект RFMEFI62114X0005).

Структурные изменения в диэлектрических кристаллах TeO_2 и $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$ во внешнем электрическом поле по данным рентгеновской дифрактометрии

А. Г. Куликов^{1, 2}, Н. В. Марченков^{1, 2}, Ю. В. Писаревский^{1, 2},
А. Е. Благов^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2}

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

В работе описываются результаты исследования приповерхностных структурных изменений, вызванных миграцией носителей заряда в монокристаллах парателлуриита ($\alpha\text{-TeO}_2$) и тетрабората лития ($\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$) с ионной проводимостью, полученные с помощью *in situ* рентгенодифракционного метода при постоянном электрическом поле.

При подаче на монокристалл парателлуриита внешнего электрического поля напряженностью до 1,8 кВ/мм в направлениях [100] и [110] зарегистрированы два типа обратимых процессов изменения кривых дифракционного отражения (КДО). Первый связан с возникновением неоднородной по глубине механической деформации решетки, вызванной обратным пьезоэффектом из-за резкого возрастания напряженности поля вблизи обеих поверхностей кристалла [1]. Одновременно зарегистрировано изменение параметра решетки в приповерхностной области кристалла у анода (поверхность кристалла с положительным внешним зарядом), вызванное оттоком кислородных вакансий во внешнем электрическом поле. Скорость протекания процесса зависит от кристаллографического направления и коррелирует с кинетикой электрической проводимости [2].

В монокристаллах тетрабората лития обнаружена перестройка дефектной структуры при воздействии на образец постоянным электрическим полем высокой напряженности, исследованная при помощи рентгеновской дифракции и электрофизических измерений. Приложение электрического поля в направлении полярной оси [001] кристалла вызывает два процесса, обусловленных разными типами ионной проводимости (Li^+ и V_O^{++}). В зависимости от напряженности прикладываемого поля (до 1,4 кВ/мм) зафиксировано нелинейное уширение и сдвиг дифракционного пика, что отражает вклад миграции как ионов лития, так и вакансий кислорода. Длительное приложение полей высокой напряженности вызывает квазиобратимые структурные изменения с эффектом памяти. При помощи времяразрешающей дифрактометрии [3] изучена динамика процесса в начальный этап формирования экранирующего слоя за счет перераспределения мобильных ионов лития с временным разрешением 10 мс.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00410 мол_а).

1. М. В. Ковальчук и др. // *Кристаллография*, 59(6), 950–954 (2014).
2. А. Г. Куликов и др. // *Письма в ЖЭТФ*, 107(10), 679–683 (2018).
3. N.V. Marchenkov et al. // *Rev. Sci. Instrum.*, 89, 095105 (2018).

Выращивание кристаллов сопряженных линейных олигомеров методом парового физического транспорта

*А. А. Кулишов¹, В. А. Постников¹, Н. И. Сорокина¹, А. Э. Волошин¹,
О. В. Борцев², Н. М. Сурин²*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

² *Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва, Россия*

Линейные сопряженные олигомеры представляют большой интерес для органической электроники и фотоники как материалы, на основе которых возможно сформировать методами роста из растворов или из пара качественные кристаллические структуры с низким содержанием дефектов, что обеспечивает максимальную производительность электрооптических свойств в оптоэлектронных устройствах. Наиболее существенной трудностью для выращивания из растворов сопряженных линейных олигомеров с числом сопряженных звеньев $n \geq 4$ является низкая растворимость. В настоящем докладе представлены результаты по росту из паровой фазы монокристаллических пленок линейных олигофенилов и их производных с концевыми заместителями $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$, и олигоаценов (антрацен, тетрацен).

Синтез и наработка олигофенилов и их производных осуществлены в ИСПМ РАН; антрацен и тетрацен синтезированы в ИНФОРУ НАНУ (г. Донецк). Рост кристаллов был осуществлен на горизонтальной установке парового физического транспорта (ПФТ) в лаборатории процессов кристаллизации Института кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН. Кристаллическая структура выращенных монокристаллических образцов (рис.) исследована с помощью монокристалльного дифрактометра Xcalibur S, а также на порошковом дифрактометре Rigaku Miniflex 600. Толщина кристаллов и их морфология исследованы методами оптической (Olympus BX61) и сканирующей лазерной конфокальной (Olympus LEXT 3100) микроскопии. Кристаллические пленки, выращенные методом ПФТ, содержат существенно меньшее количество примесей, чем выращенные из раствора, и могут обладать гладкой поверхностью с шероховатостью на уровне мономолекулярного слоя. Исследованы спектры оптического поглощения и люминесценции растворов и кристаллических пленок.

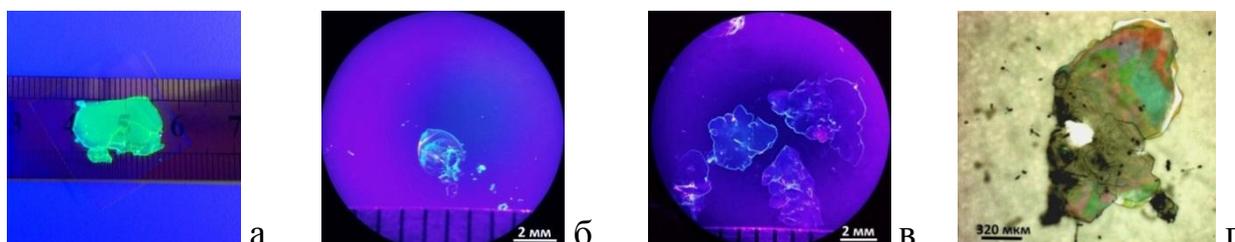


Рис. Образцы кристаллов, сопряженных линейных олигомеров: (а) – антрацен; (б) – *n*-сексифенил; (в) и (г) – производные *n*-квинкифенила и *n*-сексифенила с концевыми заместителями $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-02-00931-а).

Модифицирование поверхности циркониевого сплава Э110 методом высокоинтенсивной ионной имплантации

*А. В. Курочкин, Е. Б. Кашикарров, М. С. Сыртанов, М. Н. Бабихина,
А. И. Рябчиков, А. М. Лидер*

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия*

Циркониевые сплавы широко используются в качестве конструкционного материала для оболочек тепловыделяющих элементов активной зоны водородных энергетических реакторов. Циркониевые сплавы обладают низким сечением поглощения тепловых нейтронов, высокой коррозионной стойкостью в воде при температуре 350–360 °С и хорошими механическими свойствами. Однако, в процессе эксплуатации реакторов циркониевые сплавы подвержены коррозии и наводороживанию, что приводит к деградации их физико-механических свойств. Для повышения коррозионной стойкости и механических свойств поверхности циркониевых сплавов разрабатываются различные методы, включающие осаждение покрытий и модифицирование поверхности пучками заряженных частиц [1].

В настоящей работе была исследована возможность формирования глубоких модифицированных слоев методом низкоэнергетичной высокоинтенсивной имплантации ионов титана в сплав циркония. Имплантация осуществлялась при высоких плотностях ионного тока 120–170 мА/см². Формирование пучка ионов реализовывалось путем плазменно-иммерсионной экстракции ионов из металлической плазмы дугового разряда с их последующей баллистической фокусировкой в эквипотенциальном дрейфовом пространстве. Было показано, что в результате имплантации ионов титана в сплав циркония, толщина модифицированного слоя увеличивается от 6 до 13 мкм, при увеличении дозы от 5,4 до 9,6 × 10²⁰ ион/см² [2]. Было установлено, что высокоинтенсивная имплантация приводит к формированию в модифицированном слое мартенситной фазы на основе Zr_{0,5}Ti_{0,5} с ГПУ структурой. Образование мартенситных структур и твердых растворов замещения обеспечивают повышение твердости циркониевого сплава в 1,5 раза и износостойкости в 1,4 раза.

1. Duan Z. et al. Current status of materials development of nuclear fuel cladding tubes for light water reactors // Nuclear Engineering and Design. – 2017. – Vol. 316. – PP. 131–150.
2. Ryabchikov A.I. et al. High-intensity low energy titanium ion implantation into zirconium alloy // Applied Surface Science. – 2018. – Vol. 439. – PP. 106–112.

Синтез фотонно-кристаллических структур путем анодирования алюминия в растворах серной кислоты

С. Е. Кушнир, Т. Ю. Комарова, К. С. Напольский

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Анодный оксид алюминия (АОА) – пористый материал, получаемый в ходе электрохимического окисления алюминия. Структура пленок анодного оксида алюминия зависит от плотности тока и напряжения анодирования, поэтому возникает возможность формировать пленки с периодически изменяющейся величиной пористости вдоль нормали к поверхности. В связи с этим становится возможным синтез фотонных кристаллов из АОА – материалов с периодическим изменением показателя преломления. Фотонно-кристаллические структуры со специальными оптическими свойствами расширяют спектр применения АОА: светофильтры, цветные покрытия без красителей. Оптическими свойствами ФК, в частности положением фотонной запрещенной зоны, удастся управлять с помощью варьирования условий электрохимического окисления алюминия. На данный момент в литературе недостаточно данных о зависимости показателя преломления фотонно-кристаллических структур на основе пористого АОА от условий анодирования и чистоты используемого алюминиевого сплава.

Целью настоящей работы является разработка методики электрохимического получения пористых фотонно-кристаллических структур из анодного оксида алюминия с заранее заданными оптическими характеристиками.

В ходе экспериментов установлены зависимости толщины пленок от плотности заряда, показателя преломления от напряжения и продолжительности анодирования. На основании полученных зависимостей была разработана методика анодирования, позволяющая задавать зависимость напряжения анодирования от оптического пути внутри образца, с помощью которой удастся точно задавать оптическую длину периода, и, следовательно, положение фотонных запрещенных зон на оптических спектрах [1].

Были синтезированы фотонные кристаллы и оптические микрорезонаторы с рекордными коэффициентами добротности 60–70 и 200–270 соответственно. Были синтезированы фотонно-кристаллические структуры с заданным количеством (до 9) и положением фотонных запрещенных зон на оптических спектрах в диапазоне 250–1500 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 17-03-01369 и № 19-33-70091) и гранта Президента РФ № МК-3127.2018.3 (соглашение № 075-02-2018-823).

1. S.E. Kushnir, T.Y. Pchelyakova, K.S. Napolskii, Mater. Chem. C. 6 (2018) 12107.

Характеризация физических свойств и атомной структуры графена методом спектроскопии комбинационного рассеяния света

В. П. Левицкая¹, Д. И. Левшов¹, М. В. Авраменко¹, М. Г. Рыбин²

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

² Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия

Графен представляет собой монослой из атомов углерода, упакованных в плотную гексагональную двумерную кристаллическую решетку. Несмотря на свое достаточно недавнее обнаружение данный материал вызывает огромный интерес научного сообщества. Причина этого – необыкновенные свойства, обуславливающие столь многочисленные области применения графена и варьируемые в зависимости от атомарной структуры, а, следовательно, и от метода синтеза [1, 2].

Целью данной работы является разработка и апробация методики характеристики атомной структуры и физических свойств графена с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света. Для достижения поставленной цели на начальном этапе были получены карты комбинационного рассеяния света основных КРС-активных мод графена (G, D, 2D-полос), синтезированного методом сверхбыстрого CVD. Следующий этап состоял в проведении анализа результатов эксперимента и характеристики структуры образца. На заключительном этапе были соотнесены параметры синтеза со структурой графена, типом и количеством дефектов, вследствие чего показано существование связи между ними [3]. Полученные результаты имеют важное значение для оптимизации процедуры сверхбыстрого роста графена и для его последующей коммерциализации.

1. Madhuri Sharon, Maheshwar Sharon. Graphene. An Introduction to the Fundamentals and Industrial Applications.
2. Isaac Childres, Luis A. Jauregui “Raman Spectroscopy of graphene and related materials”.
3. A. Eckmann, A. Felten, A. Mishchenko, L. Britnell, R. Krupke, K.S. Novoselov, C. Casiraghi, Nano Lett. 2012, 12.

Интеркалирование кобальтом графена, выращенного на карбиде кремния

Е. Ю. Лобанова^{1, 2}, И. И. Пронин^{1, 2}

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Благодаря исключительным механическим, оптическим и электронным свойствам, а также рекордно высокой подвижности зарядов графен является привлекательным материалом для электроники. Одним из подходов к созданию новых материалов на его основе является внедрение атомов других веществ в межслоевое пространство между графеном и его подложкой. Внедрение магнитных металлов и создание структур типа графен-ферромагнетик-диэлектрик важно для развития спинтроники. Целью настоящей работы было получение новых знаний о электронной структуре системы графен-кобальт-карбид кремния, которая образуется при внедрении атомов кобальта под графен, выращенный на карбиде кремния.

Все расчеты были проведены в рамках метода функционала плотности. Для аппроксимации обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенно-градиентное разложение (GGA) и псевдопотенциалы PBE. Для оптимизации геометрии системы была выбрана сетка $5 \times 5 \times 1$, а для детальных расчетов электронной структуры размер сетки был увеличен до $8 \times 8 \times 1$ к-точек. Энергия обрезки была выбрана равной 100 эВ для оптимизации геометрии и 200 эВ для самосогласованных расчетов электронной структуры.

Суперъчейка состояла из четырех бислоев с графеном и буферным слоем на поверхности. Между буферным слоем и карбидом кремния располагались атомы кобальта. Суперъчейка была транслирована как гексагональная решетка Браве с постоянной, равной 10,64 Å. Толщина вакуумного промежутка составляла 16 Å.

Были проведены расчеты для различных вариантов расположений атомов кобальта между буферным слоем и подложкой. Наиболее выгодным оказался вариант, при котором атомы кобальта расположены в *fcc* положении относительно SiC. Затем для наиболее выгодного энергетически варианта была проведена оптимизация для случая одного монослоя кобальта между подложкой и буферным слоем. Расстояние между графеном и буферным слоем составило 3,24 Å, между буферным слоем и кобальтом 1,89 Å. Затем для системы графен/Co/SiC(0001) была рассчитана электронная структура. Показано, что свойства графена сохраняются в процессе интеркаляции кобальта, в то время как состояния p_z электронов буферного слоя оказываются гибридизированными с d электронами кобальта.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (задание 3.3161.2017/4.6 проектной части государственного задания).

Структура областей ближнего упорядочения шунгитового углерода

С. В. Логинова, Д. В. Логинов, В. Б. Пикулев

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

На протяжении многих лет исследованию структуры шунгитового углерода (ШУ) уделяется большое внимание. Изучение его структурных особенностей ведется с использованием различных экспериментальных методик и методов компьютерного моделирования [1]. Однако мнения о структуре шунгитового углерода до настоящего времени дискутируются.

В работе проведены исследования структуры обогащенного ШУ Шунгского месторождения методами рентгенографии, ИК-спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния. Определены размеры областей когерентного рассеяния, количественные характеристики ближнего порядка, построены 3D модели областей ближнего упорядочения порошковых образцов ШУ из анализа кривых s-взвешенных интерференционных функций $H(s)$.

Рассчитанные из кривых распределения парных функций характеристики ближнего порядка при сравнении с соответствующими значениями для гексагонального графита, свидетельствуют о том, что структура областей ближнего упорядочения в образцах ШУ образована фрагментами графитоподобных слоев.

При построении пространственных моделей структуры ШУ изначально были использованы структурные параметры гексагонального графита. Были сформированы кластеры, в которых число слоев варьировалось от 1 до 10. Размеры слоев изменялись от 10 до 50 Å. Варьировалось расстояние между слоями и взаимное положение слоев. Для построенных моделей были рассчитаны кривые $H(s)$, которые сравнивались с соответствующими кривыми, рассчитанными из экспериментальных кривых распределения интенсивности рассеяния. Для моделей с наиболее низкими значениями факторов недостоверности применялась методика искажения слоев. Наилучшее согласие с экспериментом получено для турбостратных моделей, представляющих собой наборы из пяти искаженных разориентированных друг относительно друга графеновых листов размером $26\text{Å} \times 27\text{Å}$. Толщина кластера 15 Å. Расстояния между сетками 3.5 Å. Эти данные согласуются с результатами [1]. Смещение атомов углерода в плоскости слоя и перпендикулярно ей составляет от 0.01 до 0.22 Å. Сравнение характеристик ближнего порядка, вычисленных для моделей, с соответствующими экспериментальными данными позволяет говорить о наличии вакансий.

1. Е. Ф. Шека, Н. Н. Рожкова. Шунгит – природный источник наноразмерного восстановленного оксида графена // Труды Карельского научного центра РАН, № 2. 2016. С. 89–104. DOI: 10.17076/geo264.

Одновременные структурные и магнитные фазовые превращения в хромитах никеля-кобальта со структурой шпинели

А. С. Михейкин

Физический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Структурные и магнитные фазовые превращения в системе твердых растворов хромитов никеля и кобальта со структурой шпинели интересны тем, что происходит замена активного с точки зрения эффекта Яна-Теллера магнитного катиона на неактивный магнитный, способная привести к образованию неожиданных структурных состояний, в том числе с потерей центра инверсии.

С помощью порошковой дифракции нейтронов и синхротронного излучения в диапазоне температур 5–300 К для образца $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Cr}_2\text{O}_4$ впервые показано, что структурный фазовый переход в тетрагональную фазу с соотношением параметров $c/a < 1$ происходит при 60 К, что прямо противоречит известному кооперативному эффекту Яна-Теллера в хромите никеля: тетраэдрическое окружение иона никеля должно вытягиваться вдоль одной из осей при снятии орбитального вырождения и формировать тетрагональную структуру с $c/a > 1$. При 50 К происходит следующий структурный фазовый переход из тетрагональной в ромбическую структуры. Последнее структурное превращение сопровождается магнитным фазовым переходом, что подтверждается данными нейтронной дифракции и измерениями намагниченности с помощью СКВИД-магнитометра. Близкое совпадение критических температур магнитного и структурного фазовых превращений интерпретировано как понижение симметрии, вызванное упорядочением в спиновой подсистеме.

Работа поддержана внутренним грантом Южного федерального университета № ВнГр-07/2017-23.

1. H. Ishibashi, T. Yasumi, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 310, e610–e612 (2007).
2. A.S. Mikheykin, V.I. Torgashev, Yu.I. Yuzyuk, A.A. Bush, V.M. Talanov, A. Cervellino, V.P. Dmitriev, Journal of Physics and Chemistry of Solids 86, 42–48 (2015).
3. M.R. Suchomel, D.P. Shoemaker, L. Ribaud, M.C. Kemei, R. Seshadri, Physical review B 86, 054406 (2012).
4. K. Tomiyasu, J. Fukunaga, H. Suzuki, Physical review B 70, 214434 (2004).

Оптическая невзаимность и магнитные фазовые переходы метабората меди

А. Д. Молчанова¹, К. Н. Болдырев¹, Р. В. Писарев², М. Н. Попова¹

¹ *Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

На протяжении вот уже более ста лет соединение метабората меди CuB_2O_4 привлекает внимание исследователей. Интерес к CuB_2O_4 вызван необычной комбинацией магнитных, магнитоэлектрических и оптических свойств этого соединения. Отдельную интересную задачу представляет исследование сложной магнитной структуры метабората меди. Две магнитные подсистемы меди Cu^{2+} , $4b$ и $8d$, упорядочиваются отдельно, при температурах $T_N = 21 \text{ К}$ ($4b$) и $T^* = 8.5 \text{ К}$ ($8d$). Конкуренция различных внутри- и межподсистемных обменных взаимодействий и геометрическая фрустрация обменов приводят к сложной фазовой диаграмме CuB_2O_4 с различными магнитными структурами и многочисленными спонтанными и индуцированными полем фазовыми переходами. Исследования фазовой **В-Т** диаграммы метабората меди приводятся во многих работах (см., например, 1), однако многие вопросы касательно магнитной структуры CuB_2O_4 при различных температурах и внешних магнитных полях остаются неизученными.

В настоящей работе представлено исследование спектров оптического поглощения монокристаллов CuB_2O_4 в области бесфононных линий меди Cu^{2+} . Измерения проводились при различных температурах (3–21 К) и при различных значениях постоянного внешнего магнитного поля (0–0.5 Тл) геометрий Фарадея ($\mathbf{V}_{\text{ext}} \parallel \mathbf{k}$) и Фойгта ($\mathbf{V}_{\text{ext}} \perp \mathbf{k}$). Выявлена сложная зависимость сигнала линейного антиферромагнитного дихроизма [2] от внешнего магнитного поля, зарегистрированы новые магнитные фазовые переходы. Проведены исследования на предмет наличия и величины асимметрии интенсивности оптического поглощения кристалла в зависимости от направления внешнего магнитного поля, т.н. «оптической невзаимности». Сделаны выводы относительно природы и характера наблюдаемого сигнала невзаимности. По полученным данным построена уточненная фазовая **В-Т** диаграмма метабората меди.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-20142 мол_a_вед.

1. А. И. Панкрац, Г. А. Петраковский и др., Письма в ЖЭТФ 78 (9), 1058 (2003).
2. K.N. Boldyrev, R.V. Pisarev et al., Phys. Rev. Lett. 114, 247210 (2015).

Уточнение структуры кристаллов куперита

Н. В. Мудровская, В. И. Рождествина

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск, Россия

Комплексом прецизионных методов исследована коллекция монокристаллов куперита (PtS). Исследования поверхности кристаллических граней методом электронной микроскопии показали ровную ненарушенную поверхность образцов, а также поверхность, на которой выделяются микрзоны, обогащенные платиной, и ультратонкую пористость. Согласно результатам рентгеноспектрального микроанализа исследуемые монокристаллы относятся к устойчивому купериту. Химический состав монокристаллов отличается от стехиометрического в одних образцах дефицитом платины и избытком в других. Отношение содержания Pt/S меньше характерного для стехиометрического состава. Обобщенная кристаллохимическая формула исследованных образцов может быть представлена в следующем виде: $Pt_{1-x}S_{1+x}$ ($x = -0.05-0.1$). Спорадически отмечаются микропримеси Pd, Cu и Ni. Результаты рентгеноструктурного анализа, выполненного методом монокристаллической рентгеновской дифракции, всех исследованных образцов схожи, но имеют индивидуальные особенности. Визуально дифракционные картины кроме основных рефлексов, соответствующих тетрагональной ячейке, имеют много дополнительных слабых рефлексов, которые удваивают параметры ячейки. Основным рефлексам без учета слабых соответствует известная пр. гр. $P4_2/mmc$, малая ячейка. Учет слабых рефлексов отвечает большой ячейке, пр. гр. $I4/mmm$. Атомы S статистически занимают две частные позиции. Это подтверждают исследования образцов методом КРС. Наблюдается явление плеохроизма для двух модификаций сульфида платины, соответствующих пространственной группе куперита $P4_2/mmc$ (№ 131) и пространственной группе типа брэггита $P4_2m$ (№ 84). Отсутствие явления плеохроизма характерно для кристаллов высшей симметрии – кубической сингонии. Данная полиморфная модификация сульфида платины соответствует пространственной группе $Fm-3m$ (№ 225).

Нестабильность монокристаллического куперита проявляется в подрешетке серы с переменной величиной заселенности двух позиций с локальными искажениями решетки и дефектами вакансионного типа. Монокристаллы куперита имеют многоуровневую систему организации структуры и образуются в результате твердофазных преобразований из тонкодисперсного состояния в результате перекристаллизации на различных масштабных уровнях (агрегация, уплотнение, структурирование).

Рост пленок CdTe на подложках сапфира с использованием наклонной геометрии осаждения вещества из газовой фазы

А. Э. Муслимов, А. В. Буташин, В. М. Каневский

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Кубические кристаллы теллурида кадмия CdTe являются наиболее привлекательными полупроводниковыми материалами, нашедшими применение в солнечной энергетике, оптоэлектронике в качестве детекторов в широком диапазоне излучения [1, 2]. Получение объемных кристаллов теллурида кадмия представляет весьма сложную задачу вследствие высокой температуры плавления, высокого давления паров компонентов и наличия фазовых переходов. Поэтому предпочтительными являются эпитаксиальные пленки CdTe. Одной из основных проблем при эпитаксии теллурида кадмия из газовой фазы является сложность подавления активной десорбции атомов кадмия с поверхности «горячей» подложки. В работе, предложена оптимальная методика нанесения эпитаксиальных пленок теллурида кадмия с использованием подложек с террасно-ступенчатым нанорельефом и наклонной геометрии осаждения вещества из газовой фазы по отношению к плоскости подложки. Такой подход позволяет эффективно подводить вещество, вследствие появления продольной составляющей диффузионного потока молекул и атомов по направлению к ступеням с внутренней стороны и их высокой плотностью на краю ступени с внешней стороны вследствие наличия барьера Эрлиха–Швобеля. Методами зондовой микроскопии исследованы начальные стадии роста пленки CdTe при кристаллизации из газовой фазы на структурированной подложке сапфира. Была разработана методика фазового контраста, которая в комплексе с исследованиями адгезионных и упругих свойств позволила идентифицировать островки CdTe.

Работа проведена благодаря поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий» на 2019.

1. Morales-Acevedo A. // Solar Energy. 2006. V. 80. P. 675.
2. Sellin P.J. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 2006. V. 1. P. 563.

Получение, структура и свойства метастабильных антимоноатов MSb_2O_6 ($M = Mn, Co, Ni, Cu$)

А. Ю. Никулин¹, И. Л. Шукаев¹, М. Д. Кучугура^{2, 3}

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

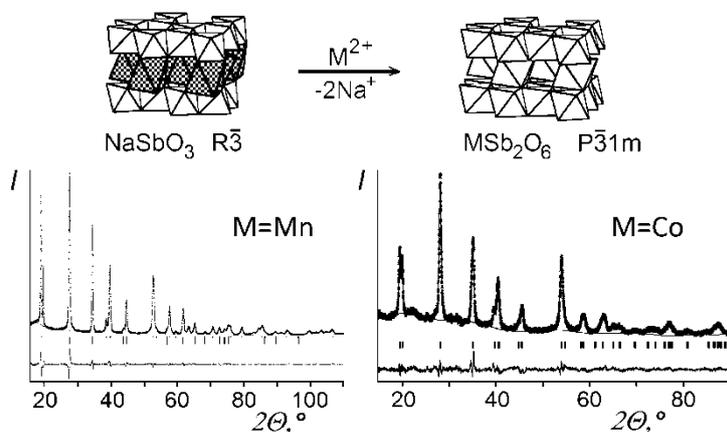
² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Слоистые соединения, содержащие в своем составе парамагнитные ионы d-элементов, могут быть интересны своими электрическими и магнитными свойствами. В частности, известны антиферромагнетики MSb_2O_6 ($M = Co, Ni, Cu$) типа трирутила и $MnSb_2O_6$ с уникальным типом структуры.

Нами получены новые формы этих соединений со слоистой структурой типа розиаита $PbSb_2O_6$ путем ионного обмена в $NaSbO_3$ типа ильменита. Антимоноатные слои в этих структурах практически одинаковые – гиббситового (сотового) типа, но укладка слоев разная из-за разного числа крупных межслоевых катионов. Поэтому при обмене ожидалась перестройка скольжением слоев без разрыва прочных связей, что и подтвердилось на опыте. Взаимодействием $NaSbO_3$ с легкоплавкими смесями MSO_4+2KCl при 420–510 °С получены изоструктурные тригональные слоистые MSb_2O_6 ($M = Mn, Co, Ni, Cu$), как показано на рисунке.

Структурно охарактеризованы и наиболее подробно изучены два соединения: $MnSb_2O_6$ и $CoSb_2O_6$, это антиферромагнетики с температурами Нееля 8,5 К и 11 К соответственно.



Работа поддержана грантом РФФИ 18-32-00297.

1. New phase of $MnSb_2O_6$ prepared by ion exchange: Structural, magnetic, and thermodynamic properties / Nalbandyan V.B., Zvereva E.A., Nikulin A.Y., *etc.* // Inorganic Chemistry, 2015.
2. Preparation and characterization of metastable trigonal layered MSb_2O_6 phases ($M = Co, Ni, Cu, Zn, \text{ and } Mg$) and considerations on $FeSb_2O_6$ / Nikulin A.Y., Zvereva E.A., Nalbandyan V.B. // Dalton Transactions, 2017.

Исследование обратного флексоэлектрического эффекта в BaTiO_3 , SrTiO_3 и KTaO_3 с помощью интерференционного метода

Е. Д. Обозова¹, В. Г. Залесский¹, А. Д. Полушина^{1, 2}, П. П. Сырников¹

¹ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Санкт-Петербургский электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

Обратный флексоэлектрический эффект (ОФЭ) является электромеханическим эффектом, при котором неоднородная деформация индуцируется электрическим полем. Эффект в значительной степени проявляется в кристаллах субмикронных и наноскопических размеров, что актуально для элементов интегральной электроники. Основная цель серии наших исследований - изучение ОФЭ в модельных диэлектриках-перовскитах BaTiO_3 (BT), SrTiO_3 (ST) и KTaO_3 (KT). В задачу входит установление типа неоднородной деформации и определение флексоэлектрических коэффициентов.

Использовались пластины из монокристаллов KT, ST и BT толщиной 150 μm и площадью 10x10 mm. На поверхности образцов наносились золотые электроды-зеркала диаметром 4 mm. К электродам прикладывалось напряжение треугольной формы.

Индуцированную деформацию на поверхности тонких монокристаллических пластин измеряли с помощью модифицированного интерферометрического микроскопа на базе серийного ЛОМО МИИ-4. В приборе в качестве когерентного источника света был установлен HeNe-лазер ($\lambda = 633 \text{ nm}$), а на окуляре была закреплена CCD-камера. Наблюдаемые интерференционные максимумы и минимумы имели вид концентрических колец, по движению которых определялся характер деформации поверхности образца. Изменения в интерференционной картине анализировались с помощью компьютерной программы, основанной на методе сравнения двух снимков. Метод позволял оценивать изменение величины радиусов колец с точностью до 0.01 λ . Интерферометр также обеспечивал сканирование всей поверхности кристалла.

Показано, что деформации сферического изгиба наблюдаются как в KT, так и в ST, а в тетрагональном BT - деформация цилиндрического изгиба.

Влияние постоянного магнитного поля на распад закаленной бериллиевой бронзы БрБ-2

Ю. В. Осинская¹, Р. Пост¹, Г. Вильде¹, С. В. Дивинский², А. В. Покоев¹

¹ *Институт физики материалов, Университет Мюнстера, Мюнстер, Германия*

² *Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Методами микротвердости, рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии выполнено исследование влияния постоянного магнитного поля (ПМП) на распад закаленной бериллиевой бронзы БрБ-2. Сплав технической бронзы БрБ-2 (Cu-1.9 вес. % Be-0.33 вес. % Ni) выдерживали 0,5 ч при 800 °С, закаливали погружением в воду и подвергали искусственному старению при температурах 325, 350 и 400 °С в течении 1 ч в ПМП 0.7 Тл и без него.

Результаты проделанной работы позволяют сделать следующие выводы:

1. Отличительной особенностью микроструктуры образца, отожженного при температуре 325 °С, является достоверно четко наблюдаемое обогащение Ni областей вблизи границ зерен и, что особенно заметно, вблизи тройных стыков. Обнаружено, что существует избыточное обогащение границ зерен Ni и без наложения ПМП, но в присутствии ПМП этот эффект значительно увеличивается

2. Наложение ПМП приводит к наибольшему приросту величины микротвердости при температуре 400 °С по сравнению со случаем его отсутствия. Полученный при этой температуре эффект достигает 38 %; при температуре 325 °С увеличение микротвердости составляет ~ 10 %.

3. Получено, что ПМП практически не влияет на параметры тонкой структуры образцов, состаренных при температуре 350 °С в течение 1 ч, что согласуется с данными по микроструктуре сплава. Однако, при температуре 400 °С наблюдается корреляция увеличения микротвердости с повышением плотности дислокации. При температуре 325 °С такой корреляции не наблюдается, что связано с многофакторностью зависимости микротвердости от структурно-физических параметров для многокомпонентных сплавов

4. Установлено, что распад сплава протекает одновременно по нескольким механизмам, в том числе путем прерывистого (ячеистого) распада. При этом активационные барьеры для прерывистого выделения вблизи тройных стыков границ зерен сплава в ПМП уменьшаются, скорость роста увеличивается и размер ячеек уменьшается. Влияние ПМП на прерывистый распад вблизи границ, а также непрерывный распад в теле зерен при исследованных режимах практически отсутствует. Обсуждается возможный механизм воздействия ПМП на прерывистый распад в сплавах на основе меди.

Получение, структура и свойства тонких пленок $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$

А. В. Павленко^{1, 2}, Д. В. Стрюков¹

¹ Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия

² Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Интенсивное развитие в последние десятилетия функциональной микроэлектроники, напрямую связанное с успехами в области физического материаловедения, способствовало тому, что в настоящее время в физике конденсированного состояния получению и исследованию свойств активных диэлектрических материалов в виде тонких пленок, таких как сегнетоэлектрики $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN-50) со структурой ТВБ, уделяется огромное внимание. Данная работа посвящена исследованиям структуры и свойств тонких пленок $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$, выращенных одностадийным методом ВЧ – катодного распыления в атмосфере кислорода.

При рентгендифракционных исследованиях было установлено, что деформация элементарной ячейки в гетероэпитаксиальных пленках SBN-50 толщиной от 14 нм до 360 нм, выращенных по механизму Вольмера–Вебера на подложках MgO (001) и характеризующихся существованием двух ориентационных доменов с углом между ними в 36.87° , остается постоянной, при этом по данным диэлектрической спектроскопии пленки обладают высокой анизотропией диэлектрических откликов. Обсуждаются причины выявленных закономерностей.

Работа выполнена в рамках реализации гранта Президента РФ № МК-4100.2018.2.

Моделирование магнитопластического эффекта в металлических сплавах

А. В. Покоев, Д. С. Синеглазов

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Экспериментальные исследования старения бериллиевой бронзы БрБ-2 в постоянном магнитном поле (ПМП) показывают заметный «отрицательный» магнитопластический эффект (МПЭ), заключающийся в увеличении микротвердости до 30 % [1]. В ряде случаев этот МПЭ сопровождается формированием структурных образований – блоков когерентного рассеяния – с размером менее 100 нм [2], который мы определили как наномангнитопластический эффект (НМПЭ). Представляет интерес поиск оптимальных режимов старения, которые приводят к наибольшим эффектам МПЭ и НМПЭ, и установление физических механизмов этих эффектов.

Методами функционала плотности и фазового поля выполнено решение ряда частных задач, нацеленных на моделирование МПЭ и НМПЭ, возникающего в медно-бериллиевых сплавах после старения закаленных сплавов в постоянном магнитном поле [1]. В частности, с помощью квантово-химической программы *Osga* выполнены расчеты энергии состояний бинарных остаточных твердых растворов медь-бериллий с различной концентрацией бериллия, и энергии фазы γ -CuBe-фазы, образующейся при распаде с наложением внешнего ПМП и без него. Показано, что энергетическое состояние остаточного твердого раствора слабо зависит от включения ПМП, в то время как наложение ПМП дает значительный выигрыш в энергии состояний γ -CuBe-фазы. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными по рентгенофазовому анализу медно-бериллиевых сплавов, состаренных в ПМП и без него, которые свидетельствуют о большем количественном содержании γ -CuBe-фазы [3], образовавшейся в ПМП.

1. J.V. Osinskaya and A.V. Pokoev. Magneto-plastic Effect in Cu-Be Alloys with Ni Additives. *Defect and Diffusion Forum*. V. 363 (2015). P. 186–189.
2. Pokoev A.V. and Osinskaya J.V. Russian Patent Specification № 2218423 (2001).
3. Yu.V. Osinskaya and A.V. Pokoev. Effect of a Constant Magnetic Field on the Structure and Physical-Mechanical Properties of Cu₅₇Be₄₃ Alloy. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2017. V. 11. No. 3. P. 544–548.

Диэлектрические свойства и полярное состояние монокристаллов $\text{PbCo}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$

*А. Д. Полушина^{1, 2}, В. Г. Залесский¹, Т. А. Смирнова¹,
М. П. Щеглов¹, С. Г. Лушников¹*

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский электротехнический университет «ЛЭТИ»

им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Кристаллы $\text{PbCo}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PCN) относятся к семейству сложных перовскитов $\text{AB}_2\text{B}'\text{O}_3$. В это семейство входят материалы с уникальными физическими свойствами: сегнетоэлектрики, релаксоры и т. д. Диэлектрические свойства кристаллов PCN характеризуются релаксороподобными максимумами диэлектрической проницаемости в окрестности 204–250 К, а при $T_N \approx 130$ К. наблюдается антиферромагнитный фазовый переход. Это позволяет рассматривать этот материал как потенциальный релаксор-мультиферроик. При этом можно отметить разброс экспериментальных данных по полярным и диэлектрическим свойствам PCN, поэтому диэлектрический спектр и проводимость требуют детальных исследований.

В работе представлены результаты исследований структуры методом FWHM XRD, температурных зависимостей проводимости и диэлектрической проницаемости в диапазоне частот от 12 Гц до 100 кГц и в интервале 77–400 К. Полярное состояние исследовалось методом термостимулированной деполяризации.

Показано, что в области 180–200 К имеются два максимума тока деполяризации, связанных со сложной температурной зависимостью релаксационной поляризации. Реальная часть комплексной диэлектрической проницаемости демонстрирует широкие максимумы в интервале 240–250 К. Показано, что локальная проводимость существует при низких (< 250 К) температурах, а при нагревании переходит в сквозную проводимость. Согласно предложенной модели в PCN существует сверхструктура из проводящих областей, которая разрушается с увеличением температуры. О наличии такой структуры также свидетельствуют данные по FWHM-исследованию.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-502-51050).

Рекристаллизация тонких пленок Pt и Ta/Pt

И. В. Росляков¹, И. А. Калинин¹, А. Н. Бельтюков², К. С. Напольский¹

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

² Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Платина обладает уникальным набором физико-химических свойств, обуславливающим использование данного металла в качестве материала для создания нагревательных элементов и термометров сопротивления. Температура рекристаллизации тонких пленок платины ниже, чем у объемного металла; они начинают деградировать при температурах менее 1000 °С. Происходящие при этом структурные изменения существенно влияют на электрофизические свойства тонкопленочного материала, стабильность которых чрезвычайно важна для продолжительного срока службы устройств и воспроизводимого аналитического сигнала.

Целью работы является исследование процессов рекристаллизации в тонких пленках платины для создания на их основе компонентов устройств микроэлектроники, функционирующих при высоких температурах.

В качестве основы для создания планарных структур использованы пористые пленки анодного оксида алюминия (АОА) толщиной 30 мкм. Структурированные в виде двумерной спирали тонкие пленки платины, толщиной 100 нм, были получены методом магнетронного напыления с использованием технологии взрывной фотолитографии. Для ряда образцов на подложку АОА наносили подслоя тантала (10 нм).

В ходе работы проведено *in situ* исследование рекристаллизации тонких пленок с использованием в качестве аналитического сигнала сопротивления, несущего информацию о структурных изменениях, происходящих в пленке. Наличие подслоя тантала значительно замедляет рекристаллизацию платины, что связано с лучшей адгезией тонких пленок Ta/Pt к пористой оксидной подложке. По данным растровой электронной микроскопии, наблюдается существенное увеличение среднего размера кристаллитов в Pt и Ta/Pt пленках при температурах > 750 °С, что хорошо согласуется с оценками размера областей когерентного рассеяния из ширины дифракционных максимумов на рентгенограммах. Рекристаллизация тонких пленок приводит к появлению текстуры в направлении <111>, что подтверждается данными дифракции обратно рассеянных электронов и рентгенофазового анализа. По данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии наблюдается диффузия подслоя Ta в структуру платины по мере увеличения температуры отжига вплоть до выхода на поверхность пленки после 12 часового отжига при 810 °С.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (соглашение № 075-02-2018-817).

Получение одномерных фотонных кристаллов на основе анодного оксида титана

А. И. Садыков, Н. А. Саполетова, С. Е. Кушнир, К. С. Напольский

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Фотонные кристаллы на основе оксида титана привлекают внимание исследователей всего мира благодаря практическим применениям в оптоэлектронике, сенсорике, фотовольтаике и фотокатализе. Интерес к таким структурам обусловлен комбинацией аномальной дисперсии фотонных кристаллов и уникальных свойств оксида титана, таких как высокий показатель преломления ($n_{\text{TiO}_2} = 2.6$ для длины волны 600 нм), высокая химическая стабильность, низкая токсичность, полупроводниковая проводимость и электрохромизм.

Фотонные кристаллы на основе пористых анодных пленок оксида титана получают путем задания периодического изменения пористости (а значит, и эффективного показателя преломления) в направлении, перпендикулярном плоскости пленки, в результате периодического изменения условий анодирования. Недавно был разработан режим анодирования, позволяющий изменять напряжение анодирования в зависимости от плотности электрического заряда $U(q)$ [1], который повышает степень контроля над формируемой пористой структурой анодного оксида титана.

Целью настоящей работы является установление связи между профилем анодирования $U(q)$ и оптическими характеристиками получаемых одномерных фотонных кристаллов на основе пористых пленок оксида титана.

Анодирование титана проводили в электролите на основе этиленгликоля, содержащем 0,3 % NH_4F , 2,0 % H_2O и 0,6 % $\text{CH}_3\text{COONH}_4$ при температуре 30 °С и интенсивном перемешивании. При анодировании использовали три формы периода профилем анодирования $U(q)$: прямоугольный, синусоидальный, пилообразный.

Показано, что с увеличением плотности заряда, приходящегося на один цикл анодирования, фотонная запрещенная зона (ФЗЗ) сдвигается в область больших длин волн, при этом коэффициент отражения в области ФЗЗ увеличивается. Для синусоидальной и пилообразной формы при увеличении верхней границы диапазона напряжений анодирования наблюдается увеличение длины волны ФЗЗ.

Оптимизация параметров синтеза позволила получить фотонные кристаллы с интенсивностью отражения свыше 60 % в области ФЗЗ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 17-73-10471) и гранта Президента РФ № МК-2534.2019.3.

1. N.A. Sapoletova, S.E. Kushnir, K.S. Napolskii, *Electrochem. Communications* 91 (2018) 5.

Получение фотонно-кристаллических структур анодированием алюминия в селеновокислом электролите

А. И. Садыков, К. С. Напольский, С. Е. Кушнир, И. В. Росляков

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Фотонные кристаллы (ФК) на основе анодного оксида алюминия (АОА) обладают рядом перспективных областей практического применения – от узкополосных светофильтров до декоративных покрытий. Синтез одномерных ФК на основе АОА проводят анодированием алюминия при циклически меняющемся напряжении или токе. В качестве электролита при этом широко используют растворы серной и щавелевой кислот. Данные о возможности получать фотонные кристаллы в селеновой кислоте отсутствуют. Согласно [1], при анодировании алюминия при постоянном напряжении в селеновой кислоте образуются пористые пленки с малой пористостью и малым диаметром пор. Вместе эти свойства должны обеспечить высокий эффективный показатель преломления и низкую интенсивность рассеяния света в коротковолновой области.

Целью данной работы являлась разработка методики синтеза фотонных кристаллов на основе АОА в селеновой кислоте и исследование их оптических свойств и микроструктуры.

В ходе экспериментов с помощью линейной вольтамперометрии было показано, что в диапазоне 0–40 В анодирование алюминия в 1,0 М H_2SeO_4 при температуре 1 ± 1 °С протекает в кинетическом режиме, т. е. при фиксированном напряжении скорость процесса не зависит от длины поры.

В работе впервые были синтезированы образцы ФК на основе АОА в селеновой кислоте. Анодирование проводили при прямоугольном профиле тока, периодически изменяя плотность тока между 0,26 и 1,04 мА/см². Полученные образцы ФК имеют ярко выраженную фотонную запрещенную зону с коэффициентом добротности в диапазоне 24–44. Стоит отметить, что коэффициент пропускания в УФ-А и УФ-В областях превышает 78 % и 72 %, соответственно, что говорит о большей прозрачности по сравнению с ФК, полученными в серной и щавелевой кислотах. Эффективный коэффициент преломления полученных фотонных кристаллов лежит в диапазоне 1,55–1,56, что несколько выше, чем значения для ФК, полученных в других электролитах. Определенная путем регистрации спектров в разных средах пористость синтезированных образцов составила 13 %.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-03-01237.

1. O. Nishinaga, T. Kikuchi, S. Natsui, R.O. Suzuki, Sci. Rep. 3, 2748 (2013).

Изучение сверхтонких взаимодействий в нецентросимметричном магнитном сверхпроводнике RhGe (B20)

Д. А. Саламатин^{1, 2}, В. А. Сидоров¹, Л. Н. Фомичева¹, А. В. Саламатин²,
А. И. Величков², М. В. Магницкая¹, Н. М. Щелкачев^{1, 4}, А. В. Николаев^{3, 4},
А. В. Цвященко^{1, 3}, М. Будзинский⁶

¹ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴ Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия

⁵ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁶ Institute of Physics, University Maria Curie-Skłodowska, Lublin, Poland

Фаза высокого давления соединения RhGe кристаллизуется в нецентросимметричной структуре B20 с постоянной решетки $a = 4.860 \text{ \AA}$. В этом соединении наблюдалось сосуществование слабого ферромагнетизма (с температурой магнитного перехода $T_m = 140 \text{ K}$) и сверхпроводимости (температура сверхпроводящего перехода $T_c = 4.3 \text{ K}$) [1]. В данной работе нами были проведены исследования сверхтонких электрических и магнитных взаимодействий в RhGe с помощью метода возмущенных угловых гамма-гамма корреляций (ВУК) на ядрах-зондах ^{111}Cd и ^{181}Ta . Также были проведены расчеты градиентов электрического поля с применением теории функционала плотности (ТФП).

В парамагнитной области значение градиента электрического поля (ГЭП) на ядрах ^{111}Cd составило $6.7 \times 10^{17} \text{ V/cm}^2$ (с параметром асимметрии $\eta = 0$) и значение ГЭП посчитанное в Ge узле решетки $-7.4 \times 10^{17} \text{ V/cm}^2$ [2]. Значения ГЭП, измеренные с использованием ядер ^{181}Ta при комнатной температуре, составляли $V_{zz1} = 2.0 \times 10^{17} \text{ V/sm}^2$ ($\eta = 1.0$) и $V_{zz2} = 1.5 \times 10^{17} \text{ V/sm}^2$ ($\eta = 0.7$). Для обоих зондов значения ГЭП слабо зависели от температуры в парамагнитной области. ВУК измерения, проведенные с использованием ^{111}Cd при $T = 90 \text{ K}$ показали, что 80 % объема образца RhGe являются парамагнитными и 20 % объема магнитные с магнитным сверхтонким полем величиной $B_{hf} = 0.55 \text{ T}$. ВУК измерения проведенные с использованием ^{181}Ta обнаружили два магнитных сверхтонких поля $B_{hf1} = 0.8 \text{ T}$ и $B_{hf2} = 3.2 \text{ T}$.

Работа была поддержана грантом РФФ 17-12-01050, грантом Полномочного представителя правительства Республики Польша в ОИЯИ и грантам РФФИ № 17-02-00064, 16-02-01122 и 16-32-00922.

1. A.V. Tsvyashchenko *et al.*, J. Alloys Compd. 686, 431 (2016).

2. M.V. Magnitskaya *et al.*, J. Magn. Magn. Mat. 470, 127 (2019).

Формирование динамически разупорядоченной системы водородных связей в кристаллах-суперпротониках при комнатной температуре

*Е. В. Селезнева¹, И. П. Макарова¹, И. А. Малышкина²,
Н. Д. Гаврилова², В. А. Коморников¹*

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

По результатам исследований комплексом физико-химических методов, установлена взаимосвязь структуры кристаллов $(K_{1-x}(NH_4)_x)_3H(SO_4)_2$ с их физическими свойствами. Обнаружено, что кристаллы, в состав которых вошло от 3 до 6 % аммония имеют структурный тип, как у соединения $K_3H(SO_4)_2$. Замещение калия на аммоний приводит к образованию дополнительных водородных связей в структуре, существенному изменению кинетики формирования суперпротонной фазы и увеличению проводимости на порядок в сравнении с кристаллами $K_3H(SO_4)_2$ (рис. 1).

Кристаллы, в состав которых вошло от 57 до 81 % аммония, в отличие от исходных соединений $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$, претерпевающих при нагревании суперпротонный фазовый переход с повышением симметрии, уже при комнатной температуре имеют такой же структурный тип, как у суперпротонной фазы $(NH_4)_3H(SO_4)_2$. Диэлектрические свойства показали, что

величина проводимости замещенных кристаллов на пять порядков выше, чем в кристаллах $K_3H(SO_4)_2$, и на четыре, чем в $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ (рис. 1). При понижении температуры были обнаружены температурные точки, при которых происходит изменение величины энергии активации, что свидетельствует о наличии структурных переходов, обуславливающих изменение механизма протонного транспорта. Для определения структуры низкотемпературной фазы были проведены дифракционные эксперименты с использованием нейтронов на станции D19a ILL (Гренобль, Франция).

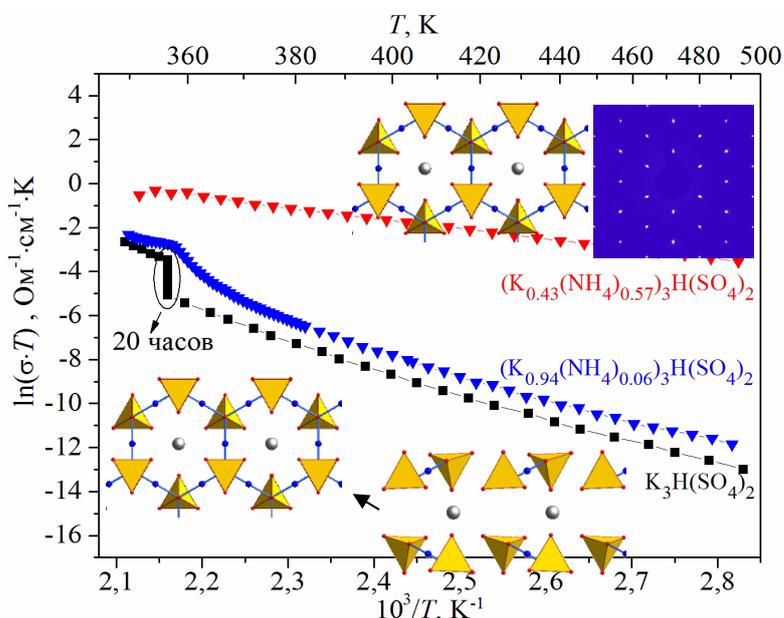


Рис.1. Проводимость исследуемых кристаллов

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 18-32-20050).

Исследование термического поведения кокимбита $\text{Fe}_{1,55}\text{Al}_{0,45}(\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$

Е. Н. Сийдра, В. Р. Абдулина, Г. А. Вальковский

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Кокимбит – один из водных сульфатов железа, образующийся при изменении сульфидсодержащих руд в условиях аридного климата. Изучение этого минерала актуально с позиции экологии, так как он содержит примесные токсичные элементы (Cu, Cd, Zn и др.) в легко растворимой форме. Растворяясь в грунтовых водах, кокимбит также дополнительно закисляет среду, что приводит к дальнейшему выветриванию и окислению железосульфидных месторождений.

Около десяти лет назад водные сульфаты железа также были обнаружены на поверхности Марса, что вызвало дополнительный всплеск интереса к их минералогии и термической стабильности.

Исследование фазовых переходов и изменений в структуре кокимбита при повышении температуры важно для определения возможных минеральных ассоциаций, например, с безводными сульфатами. Это позволит моделировать геохимические обстановки на Марсе и других планетах (с использованием этих минеральных ассоциаций как индикатора наличия воды в настоящий момент или в прошлом), и процессы окисления сульфидных месторождений на Земле.

В данной работе выполнено терморентгенографическое исследование образца кокимбита из шахты Алькапаросса (Alcaparrosa Mine, Чили) с использованием дифрактометра Rigaku “Ultima IV” с высокотемпературной приставкой Rigaku “SHT-1500”. Были исследованы фазовые переходы и тепловое расширение минерала в интервале температур от 25 до 700 °С, определены тензоры КТР. Данные о фазовых переходах сопоставлены с данными синхронного термического анализа.

Выращивание и параметры монокристаллов $\text{Ca}_3\text{Cr}_2(\text{GeO}_4)_3$

*Д. В. Симановский, Т. И. Овсецина, П. В. Андреев,
А. Л. Мургин, А. Е. Егорова, В. А. Иванов*

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

Монокристаллы выращивались из раствора в расплаве (flux-метод) методом спонтанной кристаллизации. Состав шихты состоял из 0,74 масс % $\text{Li}_2\text{O} \cdot \text{MoO}_3$, 0,17 масс % GeO_2 и 0,09 масс % CaO [2] с добавлением Cr_2O_3 в количестве 0,25 % от суммы масс Li_2O и MoO_3 . Раствор гомогенизировался при температуре 1140 °С в течение 1 ч. Выращивание производилось при режиме снижения температуры со скоростью 0,1–0,2 °С/час в течение 6 суток. Температура начала кристаллизации определялась экспериментально и находилась в диапазоне 1070–1080 °С.

В результате выращивания были получены монокристаллы изумрудно-зеленого цвета линейными размерами, не превышающими 2 мм.

В результате рентгеноструктурного анализа были получены основные параметры исследуемого кристалла (таблица). Уточнена структурная формула соединения – $\text{Ca}_3\text{Cr}_2(\text{GeO}_4)_3$.

Структура соединения кристалла $\text{Ca}_3\text{Cr}_2(\text{GeO}_4)_3$ типична для группы соединений гранатов [3], имеет каркасный характер. Атом Cr координирует 6 атомов О, формируя октаэдр с средней длиной ребра – 2.452 Å. Координация атома Ge представляет собой тетраэдр с расстояниями 2.732 и 2.954 Å. Средняя длина ребра тетраэдра – 2.843 Å.

Таблица. Параметры кристалла новой германатной фазы

Пространственная группа	$Ia\bar{3}d$
a , Å	12.2641(1)
Объем элементарной ячейки, V	1844.6(2)
Плотность кристалла, г/см ³	4.566
Число измеренных рефлексов	13858
Число независимых рефлексов	378
R_{int}	3.63 %
Число формульных единиц Z	8

1. V.A. Ivanov, M.O. Marychev, P.V. Andreev, I. Koseva, P. Tzvetkov, V. Nikolov. Novel solvents for the single crystal growth of germanate phases by the flux method – Journal of Crystal Growth 426 (2015) 25–32.
2. V.A. Ivanov, M.O. Marychev, P.V. Andreev, V.A. Lykov, M.A. Faddeev, I. Koseva, V. Nikolov. $\text{Ca}_{2-x}\text{Li}_x\text{GeO}_4$ solid solutions. Chemical composition range and fluxcrystal growth – Materials Chemistry and Physics 167 (2015) 56–60.
3. G.A. Novak, G.V. Gibbs. The Crystal Chemistry of The Silicate Garnets. – The American Mineralogist, vol. 56, may-june, 1971.

Синтез и исследование керамики $\text{PbTi}_{1/2}\text{Sn}_{1/2}\text{O}_3$

Г. А. Симачкова, Ю. А. Куприна

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Соединения с общей формулой $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Sn},\text{Ti})\text{O}_3$ интересны с точки зрения практических приложений, поскольку демонстрируют индуцированное электрическим полем переключение антисегнетоэлектрик – сегнетоэлектрик.

Нами были синтезированы поликристаллические образцы $\text{PbTi}_{1/2}\text{Sn}_{1/2}\text{O}_3$ и отработана технология спекания керамики. Образцы имеют структуру перовскита с тетрагональной симметрией элементарной ячейки с параметрами решетки $a = 3.995 \text{ \AA}$, $c = 4.056 \text{ \AA}$. По данным электрофизических, рентгенодифракционных и мессбауэровских измерений в области температур 250–260 °С обнаружен фазовый переход из тетрагональной в кубическую фазу.

При получении образцов применялась обычная керамическая технология. Традиционный для свинецсодержащих соединений температурный диапазон синтеза ($T = 800\text{--}850 \text{ }^\circ\text{C}$) не позволил получить однофазный материал. Однофазную шихту со структурой перовскита, необходимую для спекания керамических образцов, удалось получить, используя двухстадийный синтез: при $T = 950 \text{ }^\circ\text{C}$ – 4 часа и $T = 1000 \text{ }^\circ\text{C}$ – 2 часа с промежуточным помолом. Синтез контролировался рентгенофазовым анализом. Обнаружено, что длительный отжиг приводит к разрушению кристаллической структуры образцов.

Для уточнения параметров решетки использовалась модель структуры перовскита (пространственная группа $R4mm$), в первом приближении которой позицию В занимают атомы Sn и Ti в соотношении 1:1 (модель беспорядка). При уточнении параметров решетки методом Ритвелда фактор сходимости RF для всех образцов не превышал 10 % даже в присутствии примесной фазы. В результате анализа полученных данных был выработан оптимальный режим, позволяющий избежать разрушения образца в процессе спекания керамики.

Нами были получены керамические перовскитовые образцы $\text{Pb}_0\text{Sn}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$. По данным мессбауэровских и рентгенодифракционных исследований установлено полное композиционное разупорядочение катионов в В-подрешетке. Температура диэлектрической аномалии совпала с температурой появления квадрупольного расщепления.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №17-02-00616\18 и в рамках базовой части государственного задания Минобрнауки РФ (проект № 3.5710.2017/8.9)

1. Vasala S. & Karppinen M. (2015). Prog. SolidStateChem. 43, 1–36.

XANES-спектроскопия для изучения формирования активных Pt и Pd центров функционализированного МОК UiO-67

А. А. Скорынина¹, А. Л. Бугаев¹, А. В. Солдатов¹, К. Ламберти^{1, 2}

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

² Университет Турина, Турин, Италия

Использование благородных металлов для функционализации металлоорганических каркасных структур (МОК) – это перспективный способ создания новых материалов для каталитических применений [1, 2]. Несмотря на большое количество работ по синтезу МОК, функционализированных ионами металлов и наночастицами, точные механизмы структурной эволюции металлических центров до сих пор неизвестны. Определение этих механизмов, а также исследование промежуточных активных центров, образующихся в процессе синтеза, важно для синтеза материалов с заданными свойствами. В этой работе мы исследуем структурные изменения в UiO-67, функционализированном Pd и Pt в зависимости от условий активации, путем сочетания теоретических и экспериментальных методов.

Эволюция атомной и электронной структуры контролировалась с помощью спектроскопии рентгеновского поглощения в протяженной (EXAFS) и околопороговой (XANES) областях и порошковой рентгеновской дифракции. Весь массив спектроскопических данных для Pd *K*- и Pt *L₃*-краев был проанализирован методом чередующихся наименьших квадратов для решения задачи разрешения кривых (MCR-ALS) [3].

Для описания экспериментальных данных выполнены DFT-расчеты для различных потенциальных промежуточных структур активных центров, которые были отсортированы в соответствии с рассчитанными энтальпиями реакции. Для наиболее вероятных путей реакции были смоделированы XANES спектры методом конечных разностей, что позволило определить структурные изменения в процессе активации функционализированного UiO-67 в инертной и водородсодержащей средах.

1. Tanabe K.K., Cohen S.M. Postsynthetic modification of metal-organic frameworks--a progress report // Chem Soc Rev. – 2011. – Т. 40, № 2. – С. 498–519.
2. Wang Z., Cohen S.M. Postsynthetic modification of metal-organic frameworks // Chem Soc Rev. – 2009. – Т. 38, № 5. – С. 1315–29.
3. Jaumot J., de Juan A., Tauler R. MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. – 2015. – Т. 140. – С. 1–12.

Структурный фазовый переход в кристаллах ферроборатов $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, $R = \text{Ho}, \text{Y}, \text{Gd}$

*Е. С. Смирнова¹, О. А. Алексеева¹, А. П. Дудка¹, И. А. Верин¹, В. В. Артемов¹,
И. А. Гудим², К. В. Фролов¹, И. С. Любутин¹*

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Институт физики СО РАН, Красноярск, Россия*

Разнообразие физических свойств ферроборатов $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ (R – редкоземельный элемент), относящихся к классу мультиферроиков, обусловлено наличием в них двух магнитных подсистем (ионов железа и редкоземельных ионов) и геликоидальным строением кристаллической решетки. Тип магнитного иона R сильно влияет на физические свойства данного семейства соединений.

В данной работе методом рентгеноструктурного анализа в диапазоне температур 11–500 К исследованы особенности строения монокристаллов $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($R = \text{Ho}, \text{Y}, \text{Gd}$). Кристаллы получены методом кристаллизации из раствора в расплаве в присутствии $\text{BiMo}_3\text{O}_{12}$. Химический состав кристаллов уточнен методом рентгеновского энергодисперсионного элементного анализа. Итоговая формула исследуемых образцов: $\text{Gd}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, $\text{Y}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, $\text{Ho}_{0.96}\text{Bi}_{0.04}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$.

В интервале температур 11–500 К для всех кристаллов наблюдается резкий скачок параметров a , b , что говорит о наличии структурного фазового перехода (СФП) из пр. гр. $R32$ в пр. гр. $P3_121$. При понижении температуры ниже 80 К наблюдается аномальное увеличение параметра c . Определена температура СФП $T_s = 155$ К для ферробората с $R = \text{Gd}$, $T_s = 370$ К для ферробората с $R = \text{Y}$ и $T_s = 365$ К для ферробората с $R = \text{Ho}$. Структура всех кристаллов уточнена по полным наборам рентгеновских дифракционных данных в широком диапазоне температур: для монокристаллов с $R = \text{Gd}$ при $T = 90, 293$ К, с $R = \text{Y}$ при $T = 90, 295, 350, 360, 365, 370, 375, 380, 430, 500$ К, с $R = \text{Ho}$ при $T = 90, 293, 350, 360, 365, 370, 380, 390, 500$ К.

При переходе в низкотемпературную пр. гр. $P3_121$ и дальнейшем понижении температуры в кристаллах наблюдается искажение координационных полиэдров RO_6 , FeO_6 , B_2O_3 , B_3O_3 и неоднородное изменение длин связей и углов Fe-O-Fe в цепочках железа. Расстояния между атомами в геликоидальных цепочках Fe1-O-Fe1 при понижении температуры уменьшаются, а расстояния в цепочках Fe2-O-Fe2 увеличиваются.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-02-00766А).

Функциональные материалы на основе сплава Ni-Fe для электромагнитного экранирования

А. А. Солобай, С. С. Грабчиков, Д. И. Тишкевич, А. В. Труханов

*ГО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь*

В настоящее время большое внимание привлекают никелевые сплавы, такие как пермаллой (Ni-Fe), которые применяются в различных областях техники связи и радиотехнике из-за их магнитных свойств [1]. Электроосажденные материалы в виде пленок и многослойных структур интенсивно исследуются из-за научной и практической важности. Одной из возможных областей применения пленок и покрытий на основе Ni-Fe является защита от внешних полей и излучений. Развитие экранирующих технологий особенно важно на сегодняшний день.

В данной работе исследованы эффективности экранирования магнитоэлектростатических (МСТ) и низкочастотных (НЧ) электромагнитных полей многослойными структурами градиентного типа на основе системы Ni₈₀-Fe₂₀/Cu/Ni₅₀-Fe₅₀/Cu различной толщины парциальных магнитных слоев.

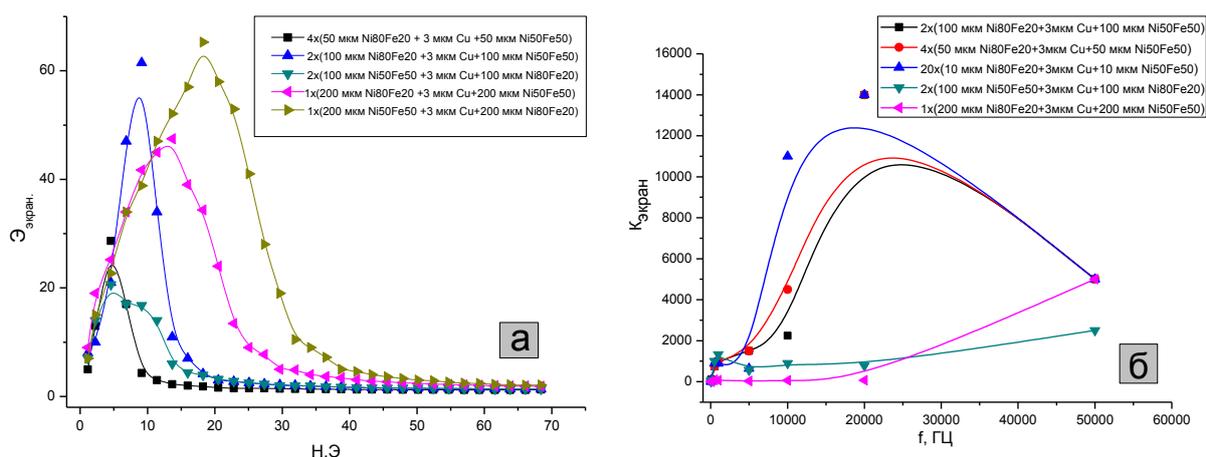


Рис. Эффективности экранирования магнитоэлектростатических (а) и низкочастотных (б) электромагнитных полей многослойными структурами градиентного типа на основе системы Ni₈₀-Fe₂₀/Cu/Ni₅₀-Fe₅₀/Cu

Обнаружено, что для защиты от МСТ и НЧ магнитных полей необходимо применять различные по составу структуры: в случае защиты от МСТ полей хорошо себя показали структуры с малым количеством слоев большей толщины (1x(200мкм Ni₅₀Fe₅₀+3мкм Cu+200мкм Ni₈₀Fe₂₀)), а для НЧ полей – с большим количеством слоев меньшей толщины (20x(10мкм Ni₈₀Fe₂₀+3мкм Cu+10мкм Ni₅₀Fe₅₀)). Это открывает широкие перспективы в практическом применении для защиты устройств микроэлектроники от электромагнитных полей.

1. X.P. Li, H.L. Seet, J. Fan, J.B. Yi, J. Magn. Mater. 304, 111–116 (2006).

Компьютерное моделирование водорастворимого производного эндофуллерепа

М. В. Солонинкина¹, Д. В. Логинов¹, М. В. Суясова²

¹ *Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия*

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Как известно, водорастворимым производным фуллеренов и эндометаллофуллеренов, на данный момент, уделяется огромное внимание в медицине, в силу их большого биомедицинского потенциала, доказательством тому служат работы [1, 2].

В данной работе моделируется структура водорастворимого эндофуллерепа $Gd@C_{82}(OH)_{40}$. Атомная структура образца была исследована ранее, посредством рентгенографического анализа, который показал, что наличие эндофуллеренов в образце выражено присутствием максимумов в малоугловой области, а углеродные поверхности дистанцированы на расстояние 3.53 \AA из-за наличия ОН-групп (рис. б).

При помощи компьютерного моделирования были получены первые модели молекулы $Gd@C_{82}(OH)_{40}$ (рис. а) и сформированы кластеры, состоящие из 4 и 8 молекул $Gd@C_{60,70,82}$, а также рассчитаны распределения $H(s)$ для данных моделей с наложением на экспериментальную кривую (рис. б). Можно отметить, что они не описывают первые дифракционные максимумы $s < 3.4 \text{ \AA}^{-1}$, но неплохо описывают средний максимум (5.3 \AA^{-1}) и «хвост» кривой в области $s > 8 \text{ \AA}^{-1}$. В настоящий момент проводится оптимизация модели методом молекулярной динамики и геометрической оптимизации.

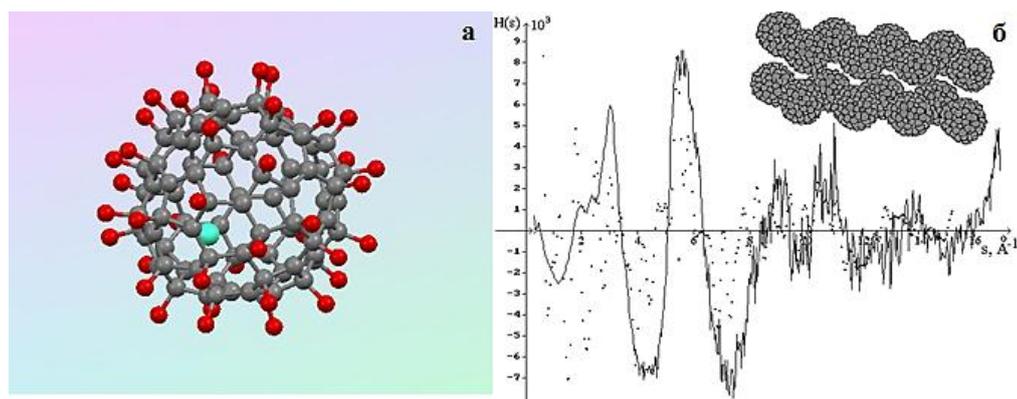


Рис. а – молекула $Gd@C_{82}(OH)_{40}$; б – модель кластера, состоящего из 8 молекул $Gd@C_{82}$, и теоретическая кривая (\cdots) распределения $H(s)$ для данной формы кластеров молекул наложенная на экспериментальную кривую ($—$)

1. Kato H., Kanazawa Y., Okumura M. et al. Lanthanoid Endohedral Metallofullerenols for MRI Contrast Agents // J. Am. Chem. Soc. 2003. V. 125. No. 14. P. 4391–4397.
2. Shilin V.A., Szhogina A.A., Suyasova M.V. et al. Fullerenes and Fullereneols Survival under Irradiation // Nanosystems: Phys. Chem. Math. 2016. V. 7. No. 1. P. 146–152.

Влияние условий синтеза исходных порошков на оптические и люминесцентные свойства керамик ZnO

А. А. Стульников, И. Д. Венецев

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия*

В оксиде цинка, как правило, в различных состояниях наблюдаются две полосы люминесценции: экситонная, с постоянной спада менее наносекунды и внутризонная, с постоянной спада 1-2 мкс. Экситонная люминесценция делает ZnO перспективным для использования в качестве быстрого сцинтиллятора [1]. Особый интерес представляют керамические сцинтилляторы, полученные методом вакуумного высокотемпературного одноосного прессования (ВВОП), ввиду относительно невысокой стоимости и простоте изготовления [2]. На параметры получаемых сцинтилляторов в значительной мере влияют, как условия синтеза керамик, так и исходного порошка.

В данной работе было исследовано влияние условий синтеза исходных порошков на оптические и люминесцентные свойства керамик ZnO, полученных методом ВВОП.

Объектами исследования являлись три образца керамик. Один был получен из микроразмерного порошка (микрочермика) Sigma-Aldrich 99 %. Два других были спрессованы из нанопорошка (наночермика), полученного осаждением микропорошка. Образец из микроразмерного порошка красного цвета, что нетипично для керамик чистого ZnO.

В ходе исследования было обнаружено, что спектры рентгенолюминесценции всех трех керамик имеют схожую форму, а полное пропускание наночермик в 1,5–2 раза ниже, чем микрочермики. Спектр пропускания микрочермики смещен в длинноволновую область, что объясняет красный цвет образца. Из полученных результатов, можно сделать вывод, что осаждение микропорошка позволяет получать образцы керамик, спектр пропускания которых, смещен в коротковолновую область, что является необходимым условием для использования ZnO в качестве быстрого сцинтиллятора, поскольку быстрая экситонная полоса люминесценции расположена на краю ультрафиолетовой области.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-52-76002.

1. T. Batsch, "Timing properties of a ZnO(Ga) scintillator (NE843)", *Nucl. Instr. and Meth.*, vol. 125, pp. 443–446, Apr. 1975.
2. Горохова Е. И., Родный П. А., Ходюк И. В., Ананьева Г. В., Димиденко В. А., Bourret-Courchesne E.D. Оптические, люминесцентные и сцинтилляционные свойства ZnO- и ZnO:Ga керамик // *Оптический журнал*. – 2008. – Т. 75, № 11. – С. 66–72.

Исследование сегнетоэлектрических нанокompозитов на основе P(VDF-TrFE) методами сканирующей зондовой микроскопии

Ю. С. Терехова¹, Д. А. Киселев¹, А. В. Солнышкин², М. В. Силибин³

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

² *Тверской государственный университет, Тверь, Россия*

³ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Зеленоград, Россия*

Сегнетоэлектрические полимеры типа поливинилиденфторида (PVDF) и сополимеры на его основе нашли широкое применение в качестве функциональных элементов различных электротехнических устройств в современной электронике ввиду своих высоких пьезоэлектрических и пирозэлектрических свойств [1]. Полимерные материалы обладают рядом преимуществ по сравнению с остальными веществами: малая плотность, стабильность электрофизических свойств, простота и относительно низкая стоимость получения. Также стоит отметить, что полимерной пленке можно придать практически любую форму без потери механической прочности и ударостойкости, что позволяет применять полимерные пленки во всех отраслях промышленности.

Структура поверхности и локальные пьезоэлектрические свойства пленочных образцов сополимера P(VDF-TrFE) и композитов на его основе (P(VDF-TrFE) + 20VA500+Fe, P(VDF-TrFE) + 5% BaTiO₃) исследовались методом силовой микроскопии пьезоотклика на сканирующей зондовой нанолaborатории Ntegra Prima (NT-MDT, Россия). Для получения изображений использовался проводящий кантилевер CSG 30/Pt. Установлено, что топография и значения шероховатости поверхности отличаются для исследуемых образцов. Величина остаточного индуцированного пьезоэлектрического отклика (ΔPR) определялась по высоте «ступени» между положительной и отрицательной заполяризованными областями. Также исследована стабильность индуцированного состояния пьезоэлектрического отклика (поляризации) от времени. Показано, что быстрее всего релаксация сигнала наблюдается у «чистого» сополимера P(VDF-TrFE), а самая медленная с добавкой титаната бария. Полученные результаты указывают на то, что пленки сополимера P(VDF-TrFE) и композиты на его основе являются перспективными материалами для использования их в качестве элементов памяти.

1. В. Е. Живулин, Д. А. Жеребцов, С. М. Лебедева, М. В. Штенберг, А. А. Осипов, Л. А. Песин. Синтез и свойства продуктов высокотемпературной термической обработки поливинилиденфторида // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. Вып. 2. С. 394–398.

Получение сложных гидросульфатов однозарядных катионов

*И. С. Тимаков, В. В. Гребенев, В. А. Коморников, О. Б. Зайнуллин,
Е. В. Селезнева*

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Изучение кристаллов-суперпротонов является актуальной задачей как для фундаментальных исследований, так и для практического применения. Кристаллы семейства $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2} \cdot xH_2O$ (где $M = K, Rb, Cs, NH_4$; $A = S, Se, P$), как исследования несут новую информацию о механизмах протонного транспорта, структуре водородной связи, ее влиянии на физику фазовых переходов и т.д.

Сочетание свойств высокой протонной проводимости ($\sigma \approx 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$) в твердом агрегатном состоянии при умеренных температурах (140–230 °С) привлекает внимание к указанному семейству кристаллов с точки зрения возможности использования их в качестве материалов для протон-обменных мембран топливных элементов [2, 3].

С целью получения новых соединений указанного семейства были изучены фазовые равновесия в четырехкомпонентной водно-солевой системе $K_2SO_4\text{--}Rb_2SO_4\text{--}H_2SO_4\text{--}H_2O$, определены условия получения сложных гидросульфатов в виде крупных монокристаллов.

Полученные результаты исследования фазовых равновесий позволили представить диаграмму фазовых равновесий для данных условий. Получены монокристаллы твердых растворов с общими формулами $(K_xRb_{(1-x)})_3H(SO_4)_2$ и $(K_xRb_{(1-x)})_2SO_4$, выявлена область кристаллизации новой фазы неизвестного состава.

Работа выполнена в рамках темы НИР № 2.2 Исследования процессов образования кристаллических материалов, их дефектной структуры и свойств, в том числе под влиянием внешних воздействий.

Экспериментальные исследования проведены с использованием оборудования ЦКП ИК РАН при поддержке Минобрнауки (проект № RFMEFI62114X0005).

1. Баранов А. И., Шувалов Л. А., Шагина Н. М. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 36. № 11. С. 381.
2. Norby T. // Nature. 2001. V. 410. P. 877.
3. Fitzgerald R. // Physics Today. 2001. V. 54. P. 21.

Многослойные радиационно-защитные экраны на основе электролитически осажденных пленок NiFe/Cu

*Д. И. Тишкевич^{1,2}, А. А. Солобай¹, Т. И. Зубарь^{1,2}, Д. С. Васин¹,
К. А. Астапович¹, А. В. Труханов^{1,2}*

¹ ГО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь

² Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

Актуальной проблемой, стоящей перед инженерами и разработчиками техники, является повышение стойкости элементов и приборов микроэлектронной техники, как в земных условиях, так и в космическом пространстве, к воздействию различного типа ионизирующих излучений. В настоящее время особое внимание уделяется исследованию многослойных структур, так как при прохождении излучений через эти материалы возможно значительное ослабление эффектов радиационного воздействия, что имеет значительный научный и прикладной интерес.

Экспериментальные образцы многослойных экранов (рис.) представляли собой чередующиеся слои NiFe и Cu, сформированные методом электролитического осаждения на алюминиевой подложке, по методике, описанной в [1].

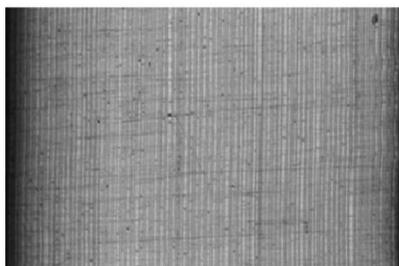


Рис. Изображение шлифа многослойного экрана на основе NiFe/Cu

Были получены три радиационных экрана: № 1 – 125 мкм NiFe×8 слоев + 5 мкм Cu×8 слоев; № 2 – 25 мкм NiFe×33 слоя + 5 мкм Cu×33 слоя; № 3 – 5 мкм NiFe×100 слоев + 5 мкм Cu×100 слоев. Облучение экранов производилось на линейном ускорителе электронов ЭЛУ-4 с $\Phi_e = 10^{13}–10^{15} \text{ см}^{-2}$. В качестве тестовых структур при облучении электронами использовались МОП-транзисторы. Эффективность экранирования определяли по отношению флюенсов, соответствующих параметрическому отказу МОП-транзистора за экраном к флюенсу без экрана.

Наибольшей эффективностью экранирования обладали многослойные экраны, содержащие: 5 мкм NiFe×100 слоев + 5 мкм Cu×100 слоев. При флюенсе электронов $\Phi = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ изменение порогового напряжения на тестовых МОП-транзисторах, расположенных за экраном, было в 4,7 раз меньше, по сравнению с неэкранированным образцом.

1. С. С. Грабчиков, С. Б. Ластовский и др., Известия НАН Беларуси, Сер. физ.-тех. наук, 2017, № 2, с. 23–29.

Изовалентное замещение в интеркалированных дихалькогенидах ниобия: влияние на хиральность структуры

Н. М. Топорова¹, Е. М. Широкалова¹, Н. В. Баранов^{1, 2}

¹ *Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Слоистые дихалькогениды переходных металлов IV и V групп M_xTX_2 ($X = S, Se, Te$; $T = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta$) обладают смешанным ионно-гомеополярным типом связи. Направленное изменение соотношения гетеро- и гомеополярной составляющих сил связи должно приводить к направленному изменению степени локализации электронных состояний и, следовательно, к изменениям физических свойств. Этого эффекта, по-видимому, можно добиться путем замещения в анионной подрешетке одного аниона другим, более или наоборот менее электроотрицательным, в частности, путем замещения серы селеном или селена теллуrom. За счет нестехиометричности состава и/или статистического распределения вакансий в подрешетке металла в соединениях M_xTX_2 наблюдаются сложные магнитные конфигурации. В частности, в соединении $Cr_{0.33}NbS_2$ реализуется индуцированный полем фазовый переход от хиральной гелимагнитной структуры к коллинеарному ферромагнитному состоянию, происходящий через образование хиральной солитонной решетки с управляемыми параметрами, что может представлять интерес для применения в устройствах спинтроники [1]. А соединение $Cr_{0.33}NbSe_2$ имеет дальний ферромагнитный порядок [2].

Поликристаллические соединения $Cr_{0.33}Nb(S_{1-y}Se_y)_2$ ($0 \leq y \leq 1$) были получены методом одностадийного твердофазного ампульного синтеза.

Для системы $Cr_{0.33}Nb(S_{1-y}Se_y)_2$ был получен ряд твердых растворов замещения во всем интервале концентраций $0 \leq y \leq 1$. Установлено, что все соединения кристаллизуются в гексагональной сингонии. При концентрации $y \leq 0.5$ сохраняется пространственная группа $P6_322$, свойственная для хирального соединения $Cr_{0.33}NbS_2$. Для исследования магнитных свойств порошки прессовались в тонкие таблетки толщиной не более 0.5 мм под значительной нагрузкой (~ 5 тонн, скорость нагружения 0.3 мм/мин), что позволяло получить текстурированные вдоль оси c образцы. Измерения намагниченности и магнитной восприимчивости проводилось в двух направлениях (вдоль оси c и перпендикулярно оси c). Для выявления особенностей в поведении магнитных характеристик, связанных с наличием/отсутствием хиральности особое внимание уделено области малых полей.

1. Togawa, Koyama T., Takayanagi K. et al., Phys. Rev. Lett. 108. 107202 (2012).

2. Gubkin A.F. et al., J. of App. Phys. 119. 013903 (2016).

Конкуренция ловушек и рекомбинационных центров в многокомпонентных алюмо-гранатах, активированных церием

Т. А. Тухватулина¹, В. М. Ханин²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Utrecht University, Utrecht, Netherlands

В настоящий момент представляют большой интерес сцинтилляторы на основе многокомпонентных гранатов, активированных Се. Они обладают высоким световыходом до 60000 фотонов/МэВ и малым временем спада 50 нс, что позволяет их использовать в качестве детекторов для медицинской томографии [1].

К сцинтилляционным детекторам, применяемым в медицине, предъявляются строгие требования к быстродействию. Наличие дефектов в кристаллической решетке увеличивает время спада рентгенолюминесценции (РЛ). Увеличение времени спада РЛ обусловлено термическим высвобождением носителей заряда из ловушек [2].

В данной работе исследовано влияние концентрации активатора Се на процессы захвата носителей заряда рекомбинационными центрами и ловушками. Использовались следующие экспериментальные методики: измерения кривых термостимулированной люминесценции (ТСЛ) и послесвечения. Для измерения кривых ТСЛ образцы предварительно подвергались рентгеновскому (20 кэВ, 10 мА) облучению в течение 5 мин. Также были измерены спектры РЛ и температурное тушение РЛ в диапазоне 77–577 К.

Объектами исследования являлись керамики многокомпонентных алюмо-гранатов следующих композиций: $\text{Lu}_1\text{Gd}_2\text{Ga}_3\text{Al}_2\text{O}_{12}:\text{Ce}$, с содержанием Се $x = 0.001, 0.01, 0.1, 0.15, 1$ моль. % и $\text{Lu}_{0,35}\text{Gd}_{2,65}\text{Ga}_{2,5}\text{Al}_{2,5}\text{O}_{12}:\text{Ce}$ содержанием Се $x = 0.1, 0.15, 0.4, 0.5$ моль. %.

В ходе исследования было обнаружено, что с увеличением концентрации Се уменьшается время послесвечения. Интенсивность ТСЛ также уменьшалась, а кривая ТСЛ сохраняла свою форму. Из этих данных можно сделать вывод, что с увеличением концентрации Се рекомбинационные центры более эффективно конкурируют с ловушками при захвате носителей заряда.

1. N.J. Cherepy, J.D. Kuntz, Z.M. Seeley, S.E. Fisher, O.B. Drury, B.W. Sturm, T.A. Hurst, R.D. Sanner, J.J. Roberts, and S.A. Payne, "Transparent ceramic scintillators for gamma spectroscopy and radiography", in Proceedings of SPIE, 2010, 78050.
2. C.W.E. van Eijk, Inorganic scintillators in medical imaging, Phys. Med. Biol. 47, 2002, R85.

Влияние изотопного состава по бору на температурную динамику атомной структуры додекаборидов LuB_{12}

О. Н. Хрыкина, А. П. Дудка, Н. Б. Болотина

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Высшие бориды RB_{12} ($R = \text{La-Lu, Y, Zr}$) обладают проводящими и магнитными свойствами, зависимость которых от состава и температуры делает эти соединения удобными модельными объектами для фундаментальных исследований и кандидатами для последующих практических применений.

Настоящая работа посвящена изучению влияния изотопного состава по бору на температурное поведение атомной структуры додекаборидов $\text{Lu}^{\text{N}}\text{B}_{12}$ ($\text{N} = 10, 11, \text{nat}$ с отношением $^{10}\text{B} : ^{11}\text{B} \approx 1:4$). База исследования – серия рентгенодифракционных экспериментов с использованием нескольких дифрактометров разного типа в широком температурном диапазоне 85–500 К и полученные высокоточные и достоверные данные. Новизна подхода заключается в разработке и применении метода оценки характеристических температур и разделения динамической и статической компонент в атомных смещениях кристаллов при многотемпературном структурном исследовании.

Кристаллы RB_{12} при комнатной температуре традиционно относят к кубической сингонии, пр. гр. $Fm\bar{3}m$. В настоящей работе установлено, что параметры элементарных ячеек кристаллов $\text{Lu}^{\text{N}}\text{B}_{12}$ имеют отклонения от кубической симметрии, однако кристаллы $\text{Lu}^{\text{nat}}\text{B}_{12}$ и $\text{Lu}^{11}\text{B}_{12}$ имеют тригональные искажения, в то время как кристалл $\text{Lu}^{10}\text{B}_{12}$ имеет тетрагональные искажения. Согласно данным по измерению сопротивления металл $\text{Lu}^{\text{nat}}\text{B}_{12}$ является наиболее совершенным проводником электричества [1] среди кристаллов трех составов, но, одновременно, по данным измерения теплоемкости [2] $\text{Lu}^{\text{nat}}\text{B}_{12}$ является и наиболее дефектным. Применение нами оригинального подхода к описанию статических и динамических компонент в атомных смещениях показало, что кристаллы $\text{Lu}^{\text{nat}}\text{B}_{12}$, действительно, наиболее разупорядочены, т. к. они характеризуются максимальным статическим смещением и атомов лютеция, и атомов бора. Подтвержден парадоксальный факт того, что кристалл $\text{Lu}^{\text{nat}}\text{B}_{12}$ одновременно является и наиболее совершенным по качеству (дифракционному [3] и по проводимости) и «дефектным» по атомным смещениям.

1. N.E. Sluchanko, A.N. Azarevich et al., J. Exp. Theor. Phys. 111. 279–284 (2010).
2. Н. Е. Случанко, А. Н. Азаревич и др., ЖЭТФ. 140, 3, 536 (2011).
3. Alexander P. Dudka, Olga N. Khrygina, et al., Journal of Alloys and Compounds. 692, 535–544 (2017).

Морфология структуры карбоната кальция CaCO_3 , полученного в процессе биоминерализации

Д. А. Головкина¹, Е. В. Журишкина¹, Н. В. Цвигун², А. Д. Япрынцева³,
А. Е. Соколов¹, А. А. Кульминская¹, А. Е. Баранчиков³, В. В. Волков²,
Г. П. Копица^{1, 4}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия

³ Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

⁴ Институт химии силикатов им. И. В. Гребенишкова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Различные факторы окружающей среды приводят к образованию трещин в бетонированных материалах. Одним из способов восстановления является биоминерализация, т. е. процесс образования минералов живыми организмами за счет реакций их метаболизма с окружающей средой [1]. В последнее десятилетие была выявлена способность некоторых бактериальных штаммов к осаждению ионов Ca^{2+} в виде CaCO_3 , которым можно заполнять образующиеся микротрещины в стенах зданий. В процессе жизнедеятельности некоторых бактерий, способных повышать значение pH окружающей среды, образуется CO_3^{2-} из CO_2 . При наличии в среде, поблизости от бактериальной клетки, свободных ионов Ca^{2+} происходит осаждение CaCO_3 , вследствие того, что клеточная стенка несет на себе отрицательный заряд, и тем самым притягивает положительно заряженные ионы Ca^{2+} . Таким образом, поверхность бактериальных клеток играет важную роль центра зародышеобразования [2].

В настоящей работе проведено культивирование бактериального штамма *Bacillus licheniformis* 8782 с использованием специальных твердых и жидких сред, содержащих мочевины и ацетат кальция, с целью получения кристаллов CaCO_3 . Обнаружено, что после 2 недель культивирования штамм *Bacillus licheniformis* 8782 продемонстрировал способность образовывать значимые количества CaCO_3 разной морфологии и цветов. Методами рентгенофазового анализа, растровой электронной микроскопии, низкотемпературной адсорбции азота, малоуглового рассеяния нейтронов, а также малоуглового рассеяния рентгеновского излучения, исследована структура образцов биогенного ангидридного CaCO_3 в зависимости от среды и условий культивирования бактериальных клеток. Установлено, что при культивировании в жидкой среде, содержащей мочевины и хлорид кальция, CaCO_3 осаждается в виде кристаллов фатерита (гексагональная сингония, пространственная группа $R\bar{6}_522$), а в случае жидкой и твердой сред, содержащих ацетат кальция, формируется кальцит (тригональная сингония, пространственная группа $R\bar{3}c$).

1. Joshi S., Goyal S., Mukherjee A. et al. J Ind Microbiol Biotechnol. 2017, 44(11), p. 1511–1525.

2. Seifan M., Samani A.K., Berenjian A. Appl Microbiol Biotechnol. 2016. 100(6), p. 2591–2602.

Динамика деформации вольфрамовой пластинки, подвергающейся импульсному тепловому воздействию

*Д. Е. Черепанов^{1,2}, А. С. Аракчеев^{1,2,3}, А. В. Бурдаков^{2,3}, И. В. Кандауров²,
А. А. Касатов^{1,2}, В. В. Куркуचेков^{1,2}, Г. Г. Лазарева^{1,3,4}, А. Г. Максимова^{1,2,4},
В. А. Попов^{1,2}, А. А. Руктуев^{2,3}, А. А. Шошин^{1,2}, А. А. Васильев^{1,2},
Л. Н. Вячеславов^{1,2}*

¹ Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

² Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

³ Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

⁴ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Россия

Эрозия вольфрамовых диверторных пластин токамака ИТЕР, вызванная значительными импульсными тепловыми нагрузками, является одной из ключевых проблем для этого международного проекта. Быстрый нагрев пластины провоцирует появление в тонком поверхностном слое металла напряжений, которые вызывают деформацию и растрескивание поверхности во время охлаждения. При экспериментальном моделировании воздействия импульсных тепловых нагрузок на вольфрамовые образцы на установке БЕТА [1] в Институте ядерной физики был обнаружен остаточный изгиб, который коррелирует с ожидаемыми остаточными напряжениями. Для характеристики напряжений была разработана бесконтактная, неразрушающая система диагностики, позволяющая наблюдать за динамикой деформаций исследуемой вольфрамовой пластинки.

Принцип работы системы основан на наблюдении за изменением положения фокуса лазерного луча, отраженного от полированной поверхности вольфрамовой пластинки, тыльной по отношению к нагреваемой. В качестве параметра, характеризующего деформацию, рассматривается радиус кривизны поверхности исследуемой пластинки. Лицевая сторона пластины нагревается электронным пучком с длительностью 0.3–0.8 мс, имеющим гауссов профиль с характерным диаметром 20 мм и создающим поток тепла 10–40 МДж·м⁻²·с^{-0.5}. Вследствие нагрева положение фокусировки лазерного луча, однозначно связанное с кривизной поверхности, изменяется.

Результаты экспериментов показывают, что остаточная кривизна поверхности вольфрамовой пластины после воздействия на нее электронным пучком увеличивается после каждого акта облучения, что говорит о росте остаточных напряжений. В настоящее время проводятся эксперименты, с целью исследования роли типа вольфрама, толщины образцов, предварительной обработки облучаемой поверхности и интенсивности теплового воздействия на изменение кривизны поверхности.

1. L.N. Vyacheslavov et al., Phys. Scripta 93 (2018) 035602.

Нанокompозитные структуры на основе ZnS_xSe_{1-x} , внедренного в матрицы пористого Al_2O_3 : исследование морфологии и анализ спектров оптического поглощения

А. И. Чукавин, Р. Г. Валеев, А. Н. Бельтюков

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

Для развития таких областей техники, как экситоника и поляритоника крайне важное значение имеет получение полупроводниковых структур, обладающих стабильными экситонами при комнатной температуре [1]. Отдельный интерес представляет получение и исследование наноразмерных композитных систем, где частицы полупроводника внедрены в диэлектрическую матрицу или матрицу более широкозонного полупроводника. В таких структурах, в случае, если диэлектрическая проницаемость матрицы много меньше, чем у внедряемого полупроводника, помимо эффекта размерного квантования возникает еще так называемый эффект диэлектрического усиления экситонов [2]. Последний приводит к еще более значительному увеличению энергии и силы осциллятора экситонов.

Таким образом, в представленной работе методом термического вакуумного напыления синтезированы композитные структуры $ZnS_xSe_{1-x}@ПАОА$, состоящие из столбчатых наночастиц твердого раствора ZnS_xSe_{1-x} со средними радиусами 17,5, 25 и 34.5 нм, включенных в диэлектрическую матрицу пористого анодного оксида алюминия (ПАОА), которые с обратной стороны закрыты тонкой пленкой напыляемого материала толщиной ~ 150 нм. Исследования полученных структур методом сканирующей электронной микроскопии показали, что форма, размеры и геометрия расположения наночастиц задаются параметрами пор матрицы. Оптические свойства исследовались методом УФ/ Вид-спектроскопии. Показано, что полученные структуры обладают стабильными экситонами при комнатной температуре. По величинам сдвига максимума экситонного пика относительно края фундаментального поглощения, определено, что средние радиусы кристаллитов ZnS_xSe_{1-x} , ответственных за эти экситонные пики, должны составлять значения, лежащие в диапазоне от 3 до 5 нм. При этом, согласно данной оценке средние радиусы кристаллитов ZnS_xSe_{1-x} не зависят от диаметров пор матрицы ПАОА.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (№ гос. регистрации № АААА-А17-117022250040 0).

1. J. K. Zettler, P. Corfdir, et al., Nano Lett. **16**(2), 973–980 (2016).
2. J.L.V. Keldysh, Excitons in Semiconductor-Dielectric Nanostructures, Phys. Stat. Sol. (a) **164**, 3–12 (1997).

Исследования ферромагнитных железосодержащих примесных фаз в образцах фосфата лития-железа (трифилиита)

М. Д. Шарков¹, М. Е. Бойко¹, А. В. Бобыль¹, А. М. Бойко¹, Е. М. Ершенко¹, Я. В. Зубавичус², В. В. Рунов³, М. В. Тренихин⁴, С. Г. Конников¹

¹ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

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

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

⁴ *Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, Омск, Россия*

Фосфат лития-железа (трифилиит) LiFePO_4 является распространенным катодным материалом для литий-ионных аккумуляторов. Для детальных структурных исследований был отобран набор образцов LiFePO_4 , изготовленных путем химического синтеза с использованием различных порошков и характеризуемых высокими разрядными емкостями и ресурсом электродов. Образцы были исследованы методами рентгеноструктурного анализа, просвечивающей и растровой электронной микроскопии, а также малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

Частично подтверждена гипотеза, что примесные фазы-фосфиды положительно сказываются на электрохимических характеристиках LiFePO_4 . В частности, в одном из образцов установлено наличие примесной ферромагнитной фазы Fe_3P . При этом при всех плотностях тока разрядная емкость электрода на основе данного образца превышала таковую в схожем по ресурсу и технологии изготовления образце, не содержащем фосфида-ферромагнетика.

Была получена зависимость массовой доли частиц образца LiFePO_4 , удерживаемых на намагниченной поверхности, от индукции приложенного магнитного поля, которая характеризовала распределение массовой доли магнитных фаз в частицах-конгломератах LiFePO_4 .

Методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей было обнаружено присутствие доменов размером $16 \div 18$ nm. Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов было показано, что в образцах, содержащих ферромагнитные фазы, магнитные домены имели размеры 17 ± 1 nm. Применение методов РСА, РЭМ и ПЭМ в совокупности позволило установить, что средний размер кристаллитов LiFePO_4 в тех же образцах примерно равен 230 nm, а фазы Fe_3P имеют вид пластин с размерами около 17×53 nm. Также было определено направление намагниченности в плоскости пластинчатых доменов 53×15 nm – параллельно меньшему габариту.

Методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии установлено, что часть кристаллитов LiFePO_4 окружена углеродными (графитными и аморфными) оболочками толщиной до 20 nm.

Показано, что разработанный комплекс исследований является полезным в поисках новых эффективных примесных фаз, оптимизации их параметров.

Дифракционное исследование теплового расширения сплава урана с ниобием

А. Е. Шестаков, И. В. Артамонов

*Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики
им. акад. Е. И. Забабахина, Снежинск, Россия*

Использованный в нашей работе сплав урана с ниобием (6,3 % вес.) был поставлен в виде цилиндрической заготовки диаметром около 20 см. Финальной обработкой была закалка от 720 °С для фиксации метастабильной α'' фазы. Образец для исследования (пластинка размерами 10 × 5 × 0,5 мм) был вырезан из массивной заготовки, рабочая поверхность была подготовлена механическим шлифованием и полировкой. Рентгенографическое исследование показало наличие α'' фазы и не выявило других фаз.

Измерения при повышенных температурах проведены на порошковом дифрактометре с фокусировкой по Брэггу-Брентано с вертикальным гониометром. Использована трубка с медным анодом. Для уменьшения окисления при нагреве применяли вакуумную ячейку с бериллиевым окном.

Были проведены измерения при 25, 60, 80, 100, 120 и 150 °С. При повышении температуры более 150 °С в материале образца начиналось фазовое превращение и на дифракционной картине появилась сильная линия высокотемпературной фазы.

Если считать, что изменение параметров решетки α'' фазы происходит линейно, то можно записать для диапазона температур от 25 до 150°:

$$a = 2,909 \cdot (1 + 3,4 \cdot 10^{-5} \cdot T), \quad b = 5,767 \cdot (1 - 3,8 \cdot 10^{-5} \cdot T), \quad c = 4,957 \cdot (1 + 14 \cdot 10^{-5} \cdot T), \\ \gamma = 92,48(1 + 8,6 \cdot 10^{-5} \cdot T),$$

где: T – температура в градусах Цельсия; множитель перед скобкой – значение параметра при нуле градусов Цельсия; множитель перед температурой – тепловой коэффициент.

Объемный коэффициент теплового расширения определялся из зависимости объема элементарной ячейки от температуры и имеет значение $\beta = 120 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Слоистые гидроксиды редкоземельных элементов (Y, Eu, Gd, Tb): синтез, химическая модификация и люминесцентные свойства

А. Д. Япрынцев¹, А. А. Родина², А. В. Гавриков¹

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

До недавнего времени единственным классом слоистых неорганических анионообменных соединений считались слоистые двойные гидроксиды – производные минерала гидроталькита $Mg_6Al_2CO_3(OH)_{16} \cdot 4H_2O$. В последние годы были предприняты успешные попытки дополнительной функционализации этих соединений за счет внедрения в их структуру катионов различных РЗЭ. Интерес к СДГ, содержащим РЗЭ, рос одновременно с интересом к металл-органическим полимерам на основе РЗЭ и в итоге привел к открытию нового класса слоистых анионообменных соединений с неорганическим остовом - слоистых гидроксидов РЗЭ (СГ РЗЭ).

СГ РЗЭ являются удобной матрицей для исследования магнитных и оптических взаимодействий лантанид-лантанид, имеют потенциал в создании сенсорных, каталитических и биоматериалов. Однако к настоящему времени не существует универсальных методик получения СГ РЗЭ, и синтез этих соединений проводят в несколько продолжительных стадий.

Цель данной работы – разработка методов направленного синтеза СГ РЗЭ (Y, Eu, Gd, Tb), интеркалированных органическими и неорганическими анионами. В качестве основного синтетического подхода использовали метод гомогенного осаждения в присутствии гексаметилентетрамина. Синтез СГ РЗЭ проводили, в том числе, в условия гидротермальной и, впервые, гидротермально-микроволновой обработки.

Метода гомогенного осаждения в условиях гидротермально-микроволновой обработки позволил в одну стадию (в течение нескольких минут) получить СГ РЗЭ (в том числе тройные), содержащие неорганические анионы (хлорид, нитрат и клозо-додекаборат) или анионы ряда алкансульфоновых, бензолкарбоновых, сульфобензойных и аминоксилот. Слоистые гидроксохлориды и нитраты РЗЭ были успешно модифицированы путем проведения анионообменных реакций с их участием. Впервые получено пероксопроизводное слоистого гидроксонитрата иттрия. Показано, что анионы бензолкарбоновых и сульфобензойных кислот приводят к сенсбилизации люминесценции катионов Tb^{3+} и Eu^{3+} в составе СГ РЗЭ.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-33-00117).

Локальная атомная структура каталитически активных центров меди по данным рентгеновской спектроскопии и DFT-моделирования

*Г. Б. Сухарина, К. Э. Бдоян, В. В. Прядченко, В. А. Дурыманов,
А. М. Ермакова, С. Ю. Каптелинин, В. В. Срабионян, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев*

*Физический факультет Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, Россия*

Катализаторы на основе Cu-цеолитов являются перспективным материалом, обеспечивающим реакцию окисления метана до метанола с высокой селективностью, поэтому определение локальной атомной структуры активных центров меди в цеолитах является важной задачей. Однако, идентификация этих активных центров проблематична, так как они могут содержать медь в различных структурных состояниях [1, 2].

В данной работе методом спектроскопии рентгеновского поглощения с использованием структурных моделей, полученных в рамках теории функционала плотности, исследована зависимость локальной атомной структуры центров меди в цеолитах типа морденит, полученных методом твердофазного ионного обмена с использованием CuCl и H-MOR, от температуры отжига на разных стадиях синтеза. Определены характерные межатомные расстояния Cu-O и соответствующие координационные числа. Установлена зависимость доли ионов меди в составе цеолита от температуры отжига.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект мол_а 18-32-00586.

1. T. Sheppard, C.D. Hamill, A. Goguet, D. W. Rooney, and J.M. Thompson, *Chemical Communications*, 2014, 50, 11053–11055.
2. M.H. Groothaert, P.J. Smeets, B.F. Sels, P.A. Jacobs, and R.A. Schoonheydt, *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127, 1394–1395.

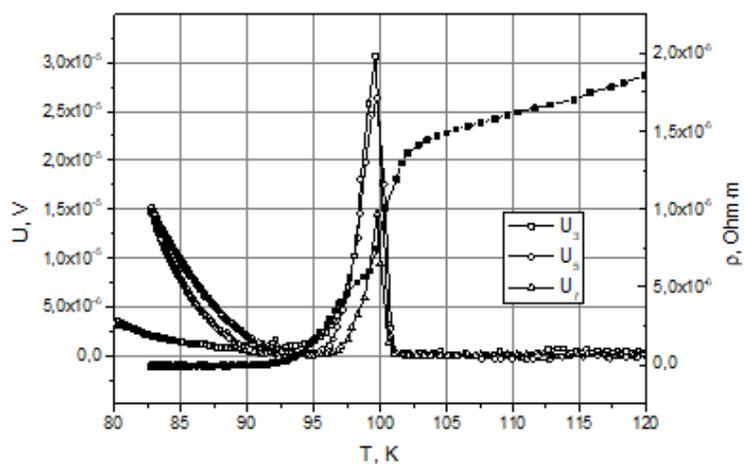
Высокотемпературные сверхпроводящие материалы на основе висмута с низким значением критического тока

А. В. Сергеев, А. Ю. Лопатин, Ю. А. Шершнева

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Для устройств слаботочной криоэлектроники научный и практический интерес вызывают нелинейные свойства сверхпроводников, в случае протекания в их объеме транспортных токов или воздействия магнитных полей. Они проявляются в виде нелинейных вольт-амперных характеристик сверхпроводника или появления высших гармонических составляющих в сигнале отклика на переменное магнитное поле.

Методом твердофазного синтеза были получены образцы многофазных



Спектральный состав сигнала отклика сверхпроводника на переменное магнитное поле

сверхпроводящих купратов $\text{Bi}_{2-x}\text{Pb}_x\text{Sr}_2\text{Ca}_n\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n+6}$, где $n = 1, 2, 3$. Полученные образцы отличались низкой плотностью (4.1 г/см^3), малым значением критического тока при температуре 77 К ($J_k \approx 33 \text{ кА/м}^2$) и большой шириной сверхпроводящего перехода ($\Delta T > 5 \text{ К}$). С полученными образцами был проведен комплекс исследований. Измерения электросопротивления

образца проводились методом вольтметра-амперметра. Спектральный состав сигнала отклика ВТСП на переменное магнитное поле индукцией $b = 1 \text{ Гс}$, частотой $f = 1000 \text{ Гц}$ направленного вдоль главной оси симметрии образца, измерялся по индуктивной методике с однослойной катушки, намотанной на образец.

Видно, что на зависимостях $U_n(T)$, где $n = 3, 5, 7$ максимум при температуре $T \approx 100 \text{ К}$ реализуется в состоянии, когда исследуемый образец сверхпроводника обладает электрическим сопротивлением $\rho \neq 0$. Установлено, что такие свойства связаны с кристаллической структурой полученных сверхпроводников, а именно – соотношением массовой доли фаз Bi-2212 и Bi-2223 [1].

1. I.M. Golev, A.V. Sergeev et al., Physics of the Solid State, 59, 1 (2017).

**Cubic to Lamellar Transition in Monoolein/Water System Driven
by Dehydration**

I. Baranova¹, A. Angelova², J. Andreasson^{1,2}, B. Angelov¹

¹ *Institute of Physics, ELI Beamlines, Academy of Sciences of the Czech Republic,
Prague, Czech Republic*

² *Institut Galien Paris-Sud, LabEx LERMIT, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay,
F-92296 Châtenay-Malabry, France*

The polymorphism of lipid/water phases plays a crucial role in the stability of lipid membranes [1]. Since 1996, the lipid cubic phase (LCP) has been successfully used for the crystallization of several important membrane proteins. Here we investigate by small and wide X-ray scattering (SAXS/WAXS) the LCP phase stability of the monoolein lipid under continuous flow of dry air. This model system is intended to bring insight into the intermediate steps during the cubic to lamellar phase transition with relevance to the crystallization of membrane proteins.

The authors are supported by the project Structural dynamics of biomolecular systems (CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000447) from European Regional Development Fund (ELIBIO), and the Czech Science Foundation project No.17-00973S. The results of the Project LQ1606 were obtained with the financial support of the Ministry of Education, Youth and Sports of Czech Republic as part of targeted support from the National Program of Sustainability II.

1. A. Angelova, V.M. Garamus, B. Angelov, Z. Tian, Y. Li, A. Zou, Adv. Coll. Interface Sci., 249, 331–345 (2017).

Исследование начальной стадии кристаллизации лизоцима методом молекулярной динамики

*Ю. В. Кордонская^{1, 2}, В. И. Тимофеев^{1, 2}, Ю. А. Дьякова^{1, 2}, М. А. Марченкова^{1, 2},
Ю. В. Писаревский^{1, 2}, Д. Д. Подшивалов^{1, 2}, А. С. Бойкова^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2, 3}*

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова*

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Рентгеноструктурный анализ белковых кристаллов является основным методом изучения пространственной структуры белковых молекул. Существенным ограничением этого метода остается необходимость получения кристаллов белка высокого дифракционного качества.

Поиск условий кристаллизации проводится эмпирически путем перебора различных условий, что часто приводит к результату спустя месяцы, а иногда годы. Эффективный подход ускоренного поиска был предложен в [1] и развит в [2], где было показано, что в пересыщенном растворе перед началом кристаллизации образуются олигомеры (для тетрагональной модификации лизоцима это октамеры), которые являются элементами роста кристалла. Экспериментальные исследования кристаллизационных растворов лизоцима с добавлением осадителя, проведенные методами малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) и малоуглового рассеяния нейтронов [3], показали наличие существенного количества октамеров и димеров, концентрация которых росла с ростом концентрации белка и осадителя и с понижением температуры. При этом возможных промежуточных олигомеров (тетрамеров и гексамеров) в нем обнаружено не было.

В данной работе в кристалле лизоцима были выделены 2 типа октамеров, которые могут служить элементарными единицами при росте кристаллов. Далее было проведено моделирование молекулярной динамики октамеров в присутствии и отсутствии осадителя (от 0 до 100 нс, при температуре 283 К и концентрации осадителя 25 мг/мл) и оценена их стабильность.

Анализ результатов показал, что в присутствии осадителя стабилен один тип исследуемых октамеров, в то время как другой диссоциирует на составные элементы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-32-00381 мол_а.

1. Ковальчук М. В., Благоев А. Е., Дьякова Ю. А. и др. // Cryst. Growth Des. V. 16. P. 1792 (2016).
2. Марченкова М. А., Волков В. В., Благоев А. Е. и др. // Кристаллография. том 61, № 1, с. 14–19 (2016).
3. Бойкова А. С., Дьякова Ю. А., Ильина К. Б. и др. // Кристаллография. Т. 62. № 6. С. 876 (2017).

Синтез и диагностика суперпарамагнитных наночастиц для тераностики в онкологии

Е. А. Кучма¹, А. В. Солдатов^{2, 1}

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

² Международный исследовательский институт «Интеллектуальные материалы», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Одним из наиболее перспективных направлений для биомедицинских технологий является применение коллоидных суперпарамагнитных наночастиц для адресной доставки терапевтических препаратов, гипертермии, магнитной резонансной томографии, в том числе для одновременной терапии и диагностики онкологических заболеваний, т. е. тераностике в онкологии. Благодаря своей биосовместимости наночастицы оксида железа являются перспективными наноматериалами для целей тераностики.

Магнитные наночастицы на основе оксида железа были синтезированы модифицированным методом соосаждения сульфата железа (II) б-ти водного и хлорида железа (III) б-ти водного с использованием микроволнового облучения SP-Discovery Microwave (CEM, USA). Физико-химические характеристики (форма, размеры, структура) исследовались с помощью ряда экспериментальных методик: TEM (Transmission Electron Microscopy), XRD (X-ray Diffraction), DLS (Dynamic Light Scattering), VSM (Vibrating Sample Magnetometer), XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure), XPS (X-ray Photoelectron Spectra), Mossbauer. Синтезированные магнитные наночастицы имеют почти сферическую форму с размерами частиц менее 20 нм (TEM) со средним размером 16 нм (XRD) и гидродинамическим радиусом 33 нм (DLS). Диагностика структуры полученных наночастиц показала γ -фазу оксида железа(III) (γ -Fe₂O₃, маггемит) (XRD, XANES). На основании мессбауэровские спектров сделан вывод о том, что полученные наночастицы оксида железа представляют собой γ -Fe₂O₃(XPS, Mossbauer). Также, результаты тестов на токсичность указывают на то, что синтезированные наночастицы не токсичны для биологических тканей. Кроме того, полученные магнитные наночастицы могут нагреваться под действием переменного магнитного поля до температур выше 40°C, поэтому данные магнитные наночастицы оксида железа являются также перспективными кандидатами для гипертермии в онкологии.

1. Glatzel et al. J. Electron. Spectr. Rel. Phenom. 188 (2013) 17–25.
2. C. Blanco-Andujar, Thanh NTK. Nanoscale. 2015, 7, 1768–1775.

Ферментативное разложение полимерных капсул с гидрофобным ядром при взаимодействии с модельной клеточной мембраной

Е. П. Миронов¹, Т. Н. Бородина¹, Т. В. Букреева²

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Полимерные биоразлагаемые микрокапсулы зарекомендовали себя в качестве перспективных носителей для направленного транспорта лекарственных средств. Использование капсул помимо защиты вещества от окружающей среды обеспечивает его контролируемое высвобождение. При изучении фармакокинетики важно исследовать взаимодействие потенциальных носителей функциональных соединений с модельными клеточными мембранами, имеющими определенную стабильную и строго контролируемую структуру. В качестве таких объектов хорошо зарекомендовали себя липидные монослои Ленгмюра.

В настоящей работе исследовано взаимодействие полимерных биоразлагаемых микрокапсул с гидрофобным ядром, сформированных с использованием низкочастотного ультразвука, с ленгмюровским монослоем димиристоилфосфатидилхолина. Контроль за процессом адсорбции частиц на границе раздела вода/воздух осуществлялся методом π -А изотерм и Брюстеровским оптическим микроскопом.

Капсулы, компонентом оболочки которых является бычий сывороточный альбумин, разрушались под действием протеолитического фермента проназы. Продемонстрирован линейный временной эффект высвобождения инкапсулированного гидрофобного соединения в условиях ферментативного разложения полимерных оболочек капсул. Начало процесса совпадает с моментом ввода фермента в жидкую субфазу. Таким образом, с использованием модели клеточной мембраны продемонстрирована начальная стадия фармакокинетического процесса, запускаемого в результате разрушения лекарственной формы и продолжающегося в виде диффузии лекарственного вещества в направлении потенциальной поверхности всасывания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00699.

Биомедицинское исследование производного C₆₀-Аргинин

Е. И. Почкаева^{1, 2}, К. Н. Семенов¹, Н. А. Чарыков³, В. В. Шаройко¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Национальный медицинский исследовательский центр им. В. А. Алмазова,
Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

Водорастворимые производные легких фуллеренов имеют широкие перспективы применения в биомедицине [1, 2] благодаря уникальному комплексу физико-химических свойств и особенностям молекулярной структуры. На сегодняшний день накоплен большой массив экспериментальных данных, посвященных изучению свойств производных легких фуллеренов с аминокислотами, а именно: физико-химических свойств (*T*-зависимости плотности, вязкости, удельной и молярной проводимости и др.) и биологической активности (противовирусной, противоопухолевой, антибактериальной и др.) [3–5].

В данной работе проводилось исследование биологической активности производного C₆₀-Аргинин, которое включало изучение механизма антиоксидантной активности C₆₀-Аргинин в реакции со стабильным радикалом дифенилпикрилгидразида (ДФПГ) и агрегации тромбоцитов в обогащенной тромбоцитами плазме, индуцированной АДФ- и коллагеном, а также исследование цитотоксичности.

Было установлено, что производное C₆₀-Аргинин обладает антиоксидантными свойствами. Доля восстановления радикала (ДФПГ) в реакции с C₆₀-Аргинин составила 64,2 %, а для аскорбиновой кислоты – 86,8 %.

При исследовании производного C₆₀-Аргинин в тестах АДФ- и коллаген-индуцированной агрегации тромбоцитов в обогащенной тромбоцитами плазме установлено, что производное обладает слабой проагрегантной активностью (коллаген: контроль – 64,2 %, C₆₀-Аргинин (100 мкМ) – 49,6 %; АДФ: контроль – 57,8 %, C₆₀-Аргинин (1 мкМ) – 75,8 %).

Исследование цитотоксичности показало, что культивирование клеток линии НЕК-293 со 100 мкМ C₆₀-Аргинин незначительно снижает пролиферативную активность клеток этой линии (контроль – 100 %; C₆₀-Аргинин – 95 %).

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 19-015-00469 А.

1. K.N. Semenov, N.A. Charykov et al., Prog. Solid State Chem. 44, 6 (2016).
2. K.N. Semenov, E.V. Andrusenko et al., Prog. Solid State Chem. 47–48 (2017).
3. K.N. Semenov, N.A. Charykov et al., J Mol Liq. 242 (2017).
4. R.A. Kotel'nikova, I.I. Faingol'd et al., Russ Chem Bull. 60 (2011).
5. Z. Hu, C. Zhang, Y. Huang, et al. Chem Biol Interact. 195 (2012).

Различие между кривой Пеано и логарифмическим фракталом в экспериментах по малоугловому рассеянию

П. М. Пустовойт^{1, 2}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, К. А. Пшеничный^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}

¹ Физический факультет Санкт-Петербургского государственного университета,
Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Основным параметром, свидетельствующим о том, что та или иная структура, представляет собой фрактал, является размерность Хаусдорфа [1]. Изучая фрактальные структуры, необходимо определить эту размерность. Интересными являются случаи, когда фрактальная размерность целочисленная. Заполняющая пространство кривая, кривая Пеано, имеет размерность Хаусдорфа равную 2 так же, как и логарифмический фрактал [2], топологическая размерность которого равна 2. Вопрос, можно ли отличить кривую Пеано или любую другую кривую, заполняющую плоскость, от логарифмического фрактала в эксперименте по малоугловому рассеянию представляет определенный интерес.

Для изучения фрактальных свойств двумерных объектов от микрометрового до сантиметрового масштабов используется метод численного Фурье-анализа, моделирующий эксперимент по малоугловому рассеянию света видимого диапазона [3]. В численном эксперименте изучены логарифмические двумерные фракталы, с топологической размерностью 1 и 2, а также различные кривые, заполняющие плоскость такие, как кривая Пеано, кривая Гилберта и кривая Госпера. Для логарифмических фракталов модельная кривая малоуглового рассеяния спадает по степенному закону q^{-1} или q^{-2} , если топологическая размерность фрактала равна 1 или 2 соответственно, где q – переданный импульс. Для кривых, заполняющих плоскость, модельная кривая малоуглового рассеяния спадает по степенному закону q^{-3} , где q – переданный импульс, как для объекта с резкой границей в двумерном пространстве.

1. В. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York (1983).

2. Indekeu J.O., Fleerackers G. // Physica A. – 1998. – V.261. – I.3. – P. 294–308.

3. Зинчик А. А. // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2009. – № 2(60).

Моделирование созревания вирусного капсида

Д. С. Рошаль¹, О. В. Коневцова¹, А.Л. Воژیч², R. Podgornik², С. Б. Рошаль¹

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

² Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia

Понимание физико-химических явлений, происходящих с вирусами во время их созревания, чрезвычайно важно, поскольку только зрелый вирус способен заражать живые клетки.

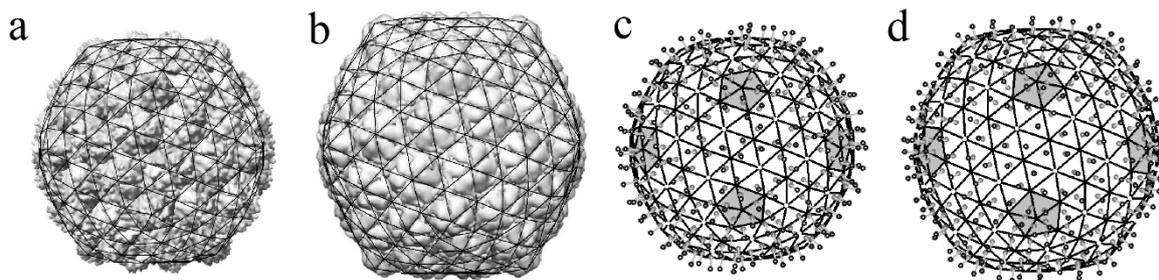


Рис. Обратимый переход из состояния Prohead-II (а,с) в EI-II (b, d) прокапсида НК-97 управляемый изменением кислотности с $\text{pH} = 7$ до $\text{pH} = 4$. В предложенной модели изменение кислотности изменяет положения и величины суммарных зарядов белков, образующих вирусную оболочку. На панелях (с, d) заряды показаны в виде маленьких шариков, закрепленных в разных положениях над упругой оболочкой, характеризующейся постоянными механическими свойствами. Смещение зарядов, происходящее за счет изменения кислотности (сравните панели (с) и (d)), изменяет как форму, так и размер результирующих равновесных оболочек, делая их похожими на экспериментально наблюдаемые структуры (а, b)

Моделируются происходящие *in vitro* при варьировании pH среды морфологические изменения белковых оболочек бактериофагов, которые очень похожие на изменения этих же оболочек *in vivo* после внедрения ДНК. Нами предложена простая электромеханическая модель, объясняющая перестройку оболочек *in vitro*. Мы используем симметричный подход [1, 2], теорию упругости тонких икосаэдрических оболочек и последние исследования зависимости распределения заряда в белковых молекулах вирусных оболочек от кислотности окружающего раствора. Форма оболочек получается путем минимизации полной электромеханической свободной энергии и зависит от распределения заряда, управляемого изменением кислотности окружающей среды. Используя предложенный подход, мы моделируем обратимый структурный переход, который происходит между состояниями Prohead II и Expansion Intermediate II бактериофага НК97 при изменении кислотности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-29-19043 мк).

1. Roshal D.S. et al. Phys. Rev. E., 94, 052605 (2016).
2. Rochal S.B. et al. Nanoscale, 10(2), 758–764 (2018).

Исследование фазовых переходов смесей DMPC/POPE методами денситометрии и малоуглового рассеяния

*В. В. Ской^{1, 2}, М. И. Рулев^{1, 3}, А. С. Казанцев³, А. А. Павлова⁴, В. В. Чупин³,
О. И. Иванов^{1, 3}, Д. В. Соловьев^{1, 3}, В. И. Горделий^{3, 5, 6}, А. И. Куклин^{1, 3}*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

³ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

⁴ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

⁵ *Institute of Complex System (ICS-6), Юлих, Германия*

⁶ *Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat
à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS, Гренобль, Франция*

Фосфатидилхолины и фосфатидилэтаноламины являются основными компонентами цитоплазматических мембран млекопитающих [1]. Объектами исследования были выбраны липиды DMPC и POPE с близкими точками главного фазового перехода 24 и 25 °С соответственно. Целью работы являлось получение представления о распределении молекул липидов в модельной двухкомпонентной липидной мембране и фазовом поведении липидной мембраны вблизи температурных точек фазовых переходов компонентов. Измерения температурной зависимости плотности водной дисперсии многослойных везикул смеси DMPC/POPE (1,5%/1,5% wt/wt) получены при помощи плотномера Anton Paar DMA5000M (ОИЯИ, Дубна, Россия). Кривые малоуглового рассеяния рентгеновских лучей получены на установке VM29 (ESRF, Гренобль, Франция), кривые малоуглового рассеяния нейтронов – на спектрометре ЮМО (ИБР2, ОИЯИ, Россия). Кривые имеют кратные дифракционные пики, соответствующие периодам повторяемости 61,4 и 65,3 Å (близким к периодам повторяемости многослойных везикул, образованных чистым POPE и DMPC). Дисперсия чистого POPE была исследована методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей на спектрометре Rigaku (МФТИ, Долгопрудный, Россия).

Приведенные данные указывают на то, что состоящая из POPE и DMPC модельная мембрана в воде образует сложную систему с неоднородным распределением липидных компонент. Денситометрические исследования водной дисперсии DMPC/POPE вблизи точек главных фазовых переходов составляющих ее липидов свидетельствуют о появлении неоднородностей в липидном бислое, либо об изменении многослойной везикулы – как морфологическом, так и структурном.

1. Navas B. et al. Composition dependence of vesicle morphology and mixing properties in a bacterial model membrane system. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes* 1716.1 (2005).

Изучение процессов самосборки фрагментов белка предшественника бета-амилоида в липидных мембранах

А. В. Скобёлкина^{1, 2}, Е. В. Бочаров³, О. В. Бочарова³, М. В. Петухов^{1, 4, 5},
П. В. Конарев^{1, 6}, Э. В. Штыкова^{1, 5}, О. В. Батищев⁴

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, Москва, Россия

⁴ Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

⁵ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия

⁶ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Болезнь Альцгеймера – самый распространенный вид нейродегенеративного заболевания в мире. Важным для изучения является установление молекулярных механизмов начальных стадий самосборки Аβ-пептида, приводящих к формированию амилоидных фибрилл. Пептид считается ключевым медиатором болезни Альцгеймера, ассоциированной с мутагенезом предшественника бета-амилоида (ПБА). Для структурной характеристики Аβ-пептида нами было использовано малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) [1]. Поскольку исследуемый фрагмент является трансмембранным, во избежание агрегации ему необходимо амфифильное окружение, например, липосомы или мицеллы. В данной работе использовался раствор, содержащий амфифильные молекулы детергента DPC, образующий мицеллы, которые связываются с гидрофобными остатками на поверхности ПБА. Для определения по данным МУРР структуры ассоциатов использовалась следующая стратегия. Первым этапом является моделирование в программе ELLMIS трехмерной мицеллы из молекул детергента в виде эллипсоидов для характеристики общей формы. Далее при помощи разностной кривой, полученной путем вычитания кривых, соответствующих мицеллам с белком и без белка, моделируется *ab initio* белок в программе DAMMIN [2]. В альтернативном подходе с использованием программы MIXTURE [2], происходит восстановление формы профиля электронной плотности мицелл с белком и без белка. Результатом работы являются гибридные модели ассоциации амилоидогенных мембранных фрагментов ПБА в комплексе с мицеллами DPC.

Данная работа была поддержана РФФИ (проекты 18-54-74001 EMBL_T, КОМФИ 17-00-00487, КОМФИ 17-00-00488 и 18-54-00019 Бел_a).

1. Svergun DI, Koch MH, Timmins PA, May RP (2013) *Small Angle X-ray and Neutron Scattering from Solutions of Biological Macromolecules*, London: Oxford University Press.
2. Franke D, Petoukhov MV, Konarev PV, Panjkovich A, Tuukkanen A, Mertens HDT, Kikhney AG, Hajizadeh NR, Franklin JM, Jeffries CM, Svergun DI (2017) *J Appl Crystallogr* 50: 1212–1225.

Сравнение структурных характеристик CBS-пирофосфатаз из разных источников, в том числе из патогенов, для выявления особенностей функционирования белков

*Е. Ю. Сошинская¹, Л. А. Дадинова¹, В. А. Анашкин²,
И. Д. Дельцов³, Э. В. Штыкова¹*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Научно-исследовательский институт физико-химической биологии им. А. Н. Белозерского МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

³ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

Неорганические пирофосфатазы (PPase) являются важными функциональными единицами любого организма, поскольку тесно связаны с синтезом жизненно важных биополимеров. Несмотря на достигнутые успехи в изучении структур и механизма действия неорганических пирофосфатаз до сих пор остается открыт вопрос о структурных особенностях PPase семейства II с регуляторной вставкой, содержащей пару CBS-доменов (названы в честь цистатионин β -синтазы, где впервые были обнаружены). Интересно, что большинство бактерий, содержащих PPase семейства II, являются патогенными.

В данной работе были получены структурные характеристики CBS-PPase из *D. hafniense* и *E. lenta* в растворе методом малоуглового рентгеновского рассеяния. Способ утилизации пирофосфата (PPi) у *D. hafniense* и *E. lenta* происходит схожим образом, при этом dh-PPase (*D. hafniense*) содержит DRTTG домен, а у el-PPase (*E. lenta*) он отсутствует. Согласно литературным данным, CBS-PPase является гомодимерным белком [1]. Однако нами показано, что оба фермента в растворе присутствуют в виде тетрамеров, но при этом способ образования этих олигомеров различен.

Результаты, полученные в ходе исследований белков в растворе, могут дать ценную информацию о новых структурных деталях, которые адекватно описывают состояние этих веществ в условиях близких к физиологическим.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-34-00918.

1. H. Tuominen, A. Salminen et al., J. Mol. Biol., 398, 400 (2010).

Моделирование внутриклеточного механизма возникновения и подавления сердечной аритмии

М. И. Шевченко, Н. М. Зорин, А. С. Москвин

*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

Выяснение молекулярных механизмов возникновения и подавления сердечной аритмии является одной из актуальнейших задач биофизики. Нами предложена и развита интегративная модель клетки водителя сердечного ритма, объединяющая модель Мальцева-Лакатты (ML) [1] сердечной клетки и электронно-конформационную (ЕС) модель рианодиновых (RyR) рецепторов – основных элементов, управляющих динамикой ионов кальция в сердечных клетках [2-4]. ML-модель клетки водителя ритма учитывает наличие «внутреннего» (Ca^{2+} -часы) и «внешнего» (мембранного) осцилляторов, взаимодействие которых обеспечивают надежность работы ритмоводителей. В основе ЕС-модели лежит предположение о «двухмодовом» характере адиабатического потенциала RyR-канала и гармоническом приближении для конформационной энергии. ЕС-модель описывает особенности поведения RyR-каналов в рабочих кардиомиоцитах и в клетках водителя сердечного ритма [2-4]. На основе объединенной модели нами разработан программный комплекс, позволяющий моделировать динамику потоков ионов в клетке и влияние параметров модели на формирование основных амплитудных и временных характеристик потенциала действия, а также возникновение, развитие и подавление «клеточной» аритмии. В частности, была смоделирована спонтанно возникающая тахикардия и показано, что подавление быстрого калиевого тока нормализует колебательный режим клетки водителя ритма, что фактически дает объяснение действию антиаритмических препаратов 3 класса.

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства РФ, соглашение № 02.A03.21.0006, и проекта № 5719 МОН РФ.

1. V.A. Maltsev, E.G. Lakatta, Am. J. Physiol. Heart Circ. Physiol., 296, H594 (2009).
2. A.S. Moskvin et al., Prog. Biophys. Mol. Biol. 90, 88 (2006).
3. A.S. Moskvin et al., Письма в ЖЭТФ. 102, 1 (2015).
4. А. С. Москвин, ЖТФ, 88, 1320 (2018).

Повышение эффективности протонной терапии при использовании РВСТ-методики

О. В. Усманов, В. Ф. Ежов

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В зависимости от плотности тканей и энергии пучка протоны могут проникать в тело на глубину до 38 см. На пути к поражаемой области (опухоли) тяжелые заряженные частицы (ТЗЧ), такие как протоны, практически не теряют энергию в виду слабого рассеяния, а также хорошо фокусируются магнитными полями, что позволяет донести к находящейся в конце пробега опухоли максимум энергии пучка. При этом участки, расположенные за опухолью, дозы облучения не получают [1].

Значительное увеличение эффекта в конце пробега (пик Брэгга), связанное с возрастанием ионизационных потерь по мере замедления ТЗЧ, по сравнению с рентгеновским излучением, обуславливает существенные преимущества использования протонов при лечении глубоко расположенных опухолей. Модуляция энергии пучка приводит к изменению глубины проникновения частиц, в результате чего достигается плоское распределение дозы облучения, охватывающей всю область опухоли (плато на кривой Брэгга). Равномерно изменяя направление облучения, можно добиться резкого снижения поражающего влияния радиации на здоровые ткани при той же поглощенной патологическим очагом дозе.

Существенно увеличить эффективность протонной терапии позволяет использование реакции $p + {}^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$, дающей генерацию трех альфа-частиц с большим радиобиологическим воздействием (proton boron capture therapy, РВСТ) [2]. Для локализации атомов бора в очаге используется препарат BSH (sodium borocaptate) с естественным изотопным содержанием ${}^{11}\text{B}$ (80 %) и ${}^{10}\text{B}$ (20 %). В соответствии с расчетами, при добавлении ${}^{11}\text{B}$ ожидается повышение целевой дозы от 2,5 до 3 раз, по сравнению с обычной протонной терапией [3].

В настоящее время ведется эксперимент по определению эффективности методики РВСТ путем облучения мишеней с биологическими образцами на синхроциклотроне СЦ-1000 (НИЦ КИ ПИЯФ) пучком протонов с энергией 100 МэВ с целью получения экспериментальных спектров (сравнение брэгговских пиков) образцов, с содержанием изотопа ${}^{11}\text{B}$ и без него.

1. Д. В. Лосев, М. Ф. Ломанов, А. П. Черняев, Аналитический расчет модифицированной кривой Брэгга. Препринт НИИЯФ МГУ, 16/729, 2003.
2. G.A.P. Cirrone, L. Manti et al., Scientific Reports, v. 8, 1141 (2018).
3. D.-K. Yoon, J.-Y. Jung, T.S. Suh, Appl. Phys. Lett. 105, 223507 (2014).

Нанодисперсный кремнезем, модифицированный трисмалонилфуллереном C₆₀

Г. О. Юрьев¹, В. Н. Постнов¹, К. Н. Семенов¹, А. С. Журавлева², Г. Г. Панова²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Агрофизический научно-исследовательский институт, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время имеются немногочисленные работы [1], в которых рассматривается биомедицинское применение нанодисперсных кремнезёмов, модифицированных фуллеренами. Фуллерены обладают антиоксидантными, свойствами, что позволяет рассматривать их как перспективные препараты для биомедицинских исследований. Развитие работ в этом направлении требует разработки новых методов синтеза конъюгатов фуллеренов с кремнезёмом, что является целью настоящей работы.

Для создания на поверхности кремнезёма (аэросила) центров хемосорбции проводили жидкофазное модифицирование носителя 3-аминопропилтриэтоксисиланом с последующим модифицированием трисмалонилфуллереном C₆₀. Конъюгат был охарактеризован методом ИК-спектроскопии. Величина удельной поверхности по методу ВЕТ составила 340 м²/г. Содержание трисмалонилфуллерена C₆₀ в конъюгате составило 0,28 мМоль/г. Определение распределения частиц методом лазерной дифракции показало, что 90 % частиц имеют размер менее 30 нм. Для диспергированных в воде частиц конъюгата величина ζ-потенциала составила –35 мВ. Были получены устойчивые водные суспензии, которые использовались в экспериментах на растениях. Было установлено, что присутствие конъюгата в концентрации 0,01 мг/л в составе корнеобитаемой среды при выращивании ярового ячменя гидропонным методом оказывает положительное влияние на физиологическое состояние растений на ранних этапах их развития. Наблюдалась тенденция к увеличению количества стеблей и массы листьев.

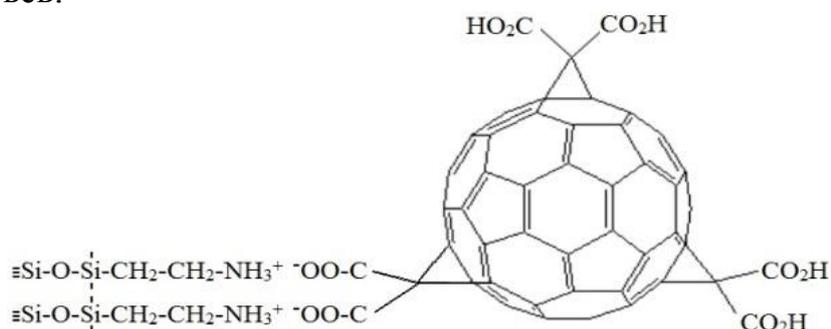


Рис. Схема строения конъюгата трисмалонилфуллерена C₆₀ и аэросила

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-015-00469. Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров «Инновационные технологии композитных наноматериалов».

1. Cataldo F., Da Ros T. Medicinal Chemistry and Pharmacological Potential of Fullerenes and Carbon Nanotubes, Rome: Springer, 2008. P. 123–137. DOI: 10.1007/978-1-4020-6845-4.

Оптические свойства полупроводниковых наноструктур на основе A^3B^5 различной формы

Р. Г. Абасзаде, С. Т. Азизов, О. А. Алиев

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

Прямое поглощение света противоречит законам сохранения энергии и импульса. Так что поглощение света происходит посредством фононов, примесей и дефектов, и импульс изменяется. Это позволяет определить механизм рассеяния с помощью поглощения света свободными носителями. Поглощение света свободными носителями с учетом центров рассеяния интенсивно изучалась в структурах квантовых ям [1–5]. В результате размерного квантования возможны переходы как внутри зоны, так и межзонные переходы.

В работе теоретически изучены оптические свойства полупроводниковых наноструктур на основе A^3B^5 различной формы, рассмотрено влияние магнитного поля и ограничивающего потенциала на эти свойства. Получено аналитическое выражение для поглощения света свободными носителями с учетом рассеяния на акустических и оптических фононов в параболических потенциальных квантовых ямах в продольном магнитном поле.

1. Абасзаде Р. Г. Механизмы рассеяния в низкоразмерных системах на основе кристаллов A^3B^5 / Материалы научной конференции НАНА, Баку, 2010, с. 3–4.
2. Бабаев М. М. Нагревание двумерного электронного газа в сильном электрическом поле // Известия НАНА, 2012, № 5, с. 10–15.
3. Ибрагимов Г. Б., Алекперов О. З. Физика наноразмерных систем. Баку: Леман, 2010. 242 с.
4. Гашимзаде Ф. М., Гасанов Х. А., Бабаев М. М. Электрическая проводимость параболической потенциальной квантовой ямы в продольном магнитном поле // Известия НАНА, 2005, № 2, с. 3–15.
5. Синявский Э. П., Соковнич С. М. Внутрizonное поглощение света в квазидвумерных системах во внешних электрическом и магнитном полях // ФТТ, 1999, т. 33, № 7, с. 828–831.

Механизм переноса заряда в новых антиферромагнитных топологических изоляторах MnBi_2Te_4

*Х. В. Алигулиева^{1, 2}, Н. А. Абдуллаев¹, З. С. Алиев^{1, 3}, И. Р. Амирасланов¹,
А. М. Шикин⁴, В. Н. Зверев⁵, Н. Т. Мамедов¹, Е. В. Чулков^{4, 6}*

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан*

³ *Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности,
Баку, Азербайджан*

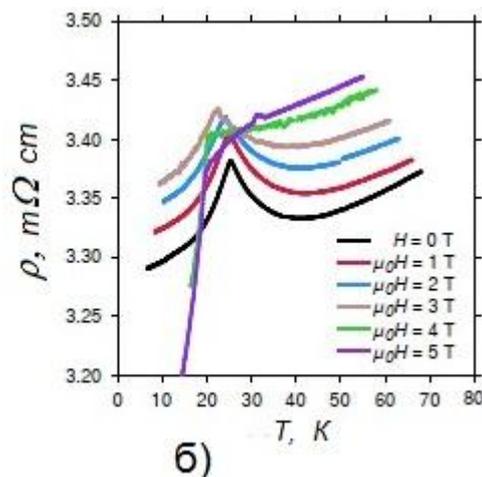
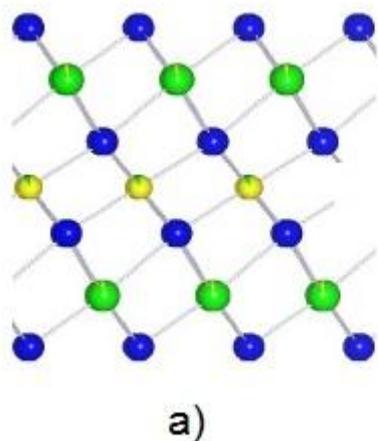
⁴ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

⁶ *Donostia International Physics Center (DIPC), San Sebastián, Spain*

Впервые получены монокристаллы новых антиферромагнитных топологических изоляторов MnBi_2Te_4 . Кристаллы MnBi_2Te_4 кристаллизуются в слоистую структуру с пространственной группой симметрии $R\bar{3}m$. В отличие от слоистых монокристаллов Bi_2Te_3 , слои в MnBi_2Te_4 содержат семь моноатомных плоскостей в последовательности Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te (рис. а). Монокристаллы MnBi_2Te_4 были охарактеризованы методами рентгеновской дифракции и рамановского рассеяния.

Из температурной зависимости удельного сопротивления в плоскости слоев (рис. б) определена температура фазового перехода парамагнетик-антиферромагнетик (температура Нееля), оказавшаяся равной 25,4 К.



Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития науки при Президенте Азербайджанской республики (гранты № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1 и № EIF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1) и гранта РФФИ № 18-52-06009.

Диэлектрические свойства $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})(\text{Ni}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$

Л. А. Алтынбаев^{1,2}, В. К. Ярмаркин¹, П. П. Сырников¹, С. Г. Лушников¹

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

Наиболее известными сегнетоэлектриками-релаксорами являются $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PMN) и $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})\text{TiO}_3$ (NBT), в которых имеется сложное замещение ионов в В- и А- позиции разновалентными катионами в перовскитной структуре ABO_3 . В настоящее время интерес вызывают составы, потенциальные релаксоры-мультиферроики, например $\text{PbNi}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$, имеющие магнитоактивный катион в В-позиции. Релаксоры обладают большими значениями пьезокоэффициентов, что представляет интерес для промышленности. Однако переход на экологически чистые, бессвинцовые материалы заставляет более активно исследовать составы NaBi-группы. Поэтому впервые была синтезирована керамика $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})(\text{Ni}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ (NBNN), рассматриваемая как потенциальный релаксор-мультиферроик.

В работе представлены исследования структуры с помощью дифрактометра ДРОН-3 линия $\text{CuK}\alpha$ (1.54178 Å) и температурной зависимости диэлектрической проницаемости в диапазоне частот от 12 Гц до 100 кГц и в интервале 77 – 400 К. Структурные исследования NBNN подтверждают структуру перовскита. Диэлектрические измерения показывают, что при комнатной температуре и на частоте 1 кГц диэлектрическая постоянная равна 250, а тангенс потерь – 0.004. Температурная зависимость характеризуется релаксороподобными широкими и частотозависимыми максимумами в окрестности (-100 – -50) С (173 – 190 К). В области 50 С (320 К) также имеется аномалия, которая может быть обусловлена фазовым переходом. Предварительные результаты предполагают дальнейшее исследование нового потенциального релаксора-мультиферроик.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18 -02-01084).

Высокоспиновые парамагнитные ионы в качестве кубитов и кутритов для квантовых вычислений

М. Р. Арифуллин, В. Л. Бердинский

Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия

В работе рассмотрен новый способ реализации квантового компьютера и квантовых вычислений [1] на основе парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле [2]. Предложена схема квантовых логических операции с помощью СВЧ импульсов со сдвигом фазы на примере кристаллов с парамагнитными ионами Ni(2+) и нулевым ядерным спином. Такие импульсы позволяют реализовать квантовые логические операции. Например, логическая операция «фазовый сдвиг», которая является ключевым элементом в реализации квантового преобразования Фурье. Показано, что расщепление уровней парамагнитных ионов со спином $S > 1/2$ в нулевом магнитном поле, то есть в поле кристаллической решетки с парамагнитным ионом позволяет поддерживать когерентность и не применять сильные магнитные поля.

1. F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa, A. Gruber, and J. Wrachtrup, Phys. Rev. Lett. , 2004, 92, 076401.
2. Y. Sekiguchi, Y. Komura, S. Mishima, T. Tanaka, et al., Nat. Commun. 11668, 7 (2016).

Теоретическое и экспериментальное определение плотности дислокационных дефектов в титановом сплаве ВТ6 после холоднокатаной пластической деформации

М. Н. Бабихина, Р. С. Лантев, А. В. Курочкин, В. Н. Кудияров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

При изучении различного рода дефектов в основном используют теоретические расчеты, которые ограничены только изучением энергии их формирования и не рассматривают такие процессы как кинетика, механизмы формирования и эволюции. При этом для исследования данных явлений и процессов в дефектообразовании существует достаточно ограниченное количество методов. Однако наиболее эффективными и чувствительными методами идентификации разного рода дефектов являются методы позитронной спектроскопии. Данные методы позволяют определять не только тип и концентрацию дефектов, но и их химическое окружение [1].

Однако, для получения количественной и качественной оценки количества дефектов методами позитронной спектроскопии необходима дополнительная информация о базовых дефектах и их влиянии на характеристики позитронной аннигиляции. В данной работе материалом для исследования был выбран титановый сплав марки ВТ6, так как данный материал нашел свое широкое применение в авиастроении, и изучение процесса формирования разного рода несовершенств кристаллической структуры в данном сплаве до сих пор остается актуальным. Также одним из сторонних методов оценки количества дефектов является рентгеноструктурный анализ кристаллической структуры.

В данной работе для создания преимущественно дислокационных дефектов был использован метод холоднокатаной пластической деформации. Для анализа дефектов применялись методы анализа временного распределения аннигиляции позитронов и совпадений доплеровского уширения аннигиляционной линии. Применяя данные методы, можно будет установить закономерности изменения аннигиляционных характеристик от плотности дислокаций, а также влияние примесей и легирующих элементов [1].

Принимая во внимание все вышесказанное, целью данной работы является теоретическое и экспериментальное определение концентрации дислокационных дефектов в титановом сплаве ВТ6 после холоднокатаной пластической деформации.

1. Лидер А. М. Позитронная спектроскопия для контроля микроструктурных изменений в системах «металл-водород» дисс. док. тех. наук. Томский политехнический университет, Томск, 2017.

Компьютерное моделирование магнитных фазовых переходов в аморфных сплавах Re-Gd

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, И. М. Пашуева

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Экспериментально обнаружено, что в аморфных сплавах (АС) системы Re-Gd в широкой области концентраций имеет место переход из парамагнитной фазы в состояние спинового стекла.

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфного гадолиния и аморфных сплавов $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 4, 5, 7, 8, 10, 12, 37, 61, 93$ ат. %), содержащие по 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследовались магнитные свойства построенной модели.

Гамильтониан, описывающий взаимодействие магнитных моментов атомов гадолиния, был записан в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_2(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k),$$

где $J_1 = 45,7$ К – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми не превышает $r_1^{\min} = 0,455$ нм – положения первого минимума парной функции радиального распределения $g(r)$; $J_2 < 0$ – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми находится в интервале между r_1^{\min} и $r_2^{\min} = 0,77$ нм – первым и вторым минимумами функции $g(r)$.

Для модели чистого аморфного Gd рассчитаны температурные зависимости спонтанной намагниченности при различных значениях отношения констант обменного взаимодействия $J_1/|J_2|$. При различных значениях $J_1/|J_2|$ реализуются ферромагнитное, асперомагнитное и спин-стекольное состояние.

Температура магнитного фазового перехода T_f определялась по положению максимума на температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$. Таким образом, была получена магнитная фазовая диаграмма аморфного гадолиния в координатах $J_1/|J_2| - T$, позволяющая определить фазовое состояние системы в зависимости от температуры и величины интеграла обменного взаимодействия во второй координационной сфере J_2 .

Во всех моделях АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ при $x > 7$ ат. % и $J_1/|J_2| = 10$ наблюдается переход из парамагнитного состояния в состояние спинового стекла. Зависимость температуры перехода T_f от концентрации атомов Gd хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Расчет температурной зависимости структурных свойств Cu_3N с помощью молекулярной динамики из первых принципов

Д. Бочаров¹, Я. Тимошенко², А. Анспокс¹, А. Калинин³, А. Кузьмин¹, М. Крак⁴

¹ *Институт физики твердого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия*

² *Кафедра материаловедения и химической инженерии, Университет Стони Брука, США*

³ *Отделение химии, Факультет естественных наук, Университет Падерборна, Германия*

⁴ *Институт Пола Шеррера, Филлиген, Швейцария*

Нитрид меди (Cu_3N) имеет кубическую структуру типа антиперовскита, состоящую из октаэдров NCu_6 , соединенных между собой через вершины. Динамические свойства решетки Cu_3N определяются анизотропными тепловыми колебаниями атомов меди, амплитуда колебаний которых больше в направлении перпендикулярном линейным цепочкам N-Cu-N. Кроме того параметры тепловых колебаний указывают на некоторую неупорядоченность в позициях атомов Cu, что может быть причиной структурной нестабильности Cu_3N под давлением. Кроме того, Cu_3N имеет низкую температуру разложения, порядка 300–470 °С.

В настоящей работе представлены результаты расчетов методом молекулярной динамики из первых принципов (AIMD) в интервале температур от 300 К до 700 К, с целью описать динамику решетки нитрида меди и оценить степень ангармоничности связи в парах атомов Cu-N и Cu-Cu.

Полученные теоретические результаты были использованы для расчета спектров рентгеновского поглощения на К-крае Cu методом MD-EXAFS [1] и сравнивались с экспериментальными данными. Мы продемонстрировали эффективность подхода MD-EXAFS в сочетании с методом AIMD для проверки теории и описания зависящих от температуры структурных свойств в Cu_3N .

Исследование поддержано проектом № 1.1.1.2/VIAA/I/16/147 (1.1.1.2/16/I/001) в рамках программы “Post-doctoral research aid”, реализуемым в Институте физики твердого тела Латвийского университета.

1. A. Kuzmin and R.A. Evarestov, J. Phys.: Condens. Matter 21, 055401 (2009).

Реакционная способность смешанных теллуридов-селенидов сурьмы

А. А. Вольхов^{1, 2}, Е. В. Гербер¹

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

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

Топологические изоляторы (ТИ) – новый и чрезвычайно перспективный класс материалов, которые являются изоляторами в объеме и имеют проводящие спин-поляризованные состояния на поверхности, возникающие в результате спин-орбитального взаимодействия. Наиболее исследуемыми ТИ в настоящее время являются халькогениды сурьмы и висмута и материалы на их основе. Твердые растворы на основе ТИ могут быть использованы для плавного регулирования их функциональных свойств (ширины запрещенной зоны, положения уровня Ферми и др.) Для определения условий синтеза и эксплуатации имеет значение реакционная способность материалов по отношению к компонентам атмосферы.

Ранее была систематически исследована реакционная способность твердых растворов с катионным замещением в системе $(\text{Sb,Bi})_2\text{Te}_3$ [1]. В настоящей работе методом РФЭС, в том числе *in situ* (NAP XPS – РФЭС при давлениях, близких к атмосферным) и *ex situ* (выдерживание образца заданное время в атмосфере при фиксированной влажности после скола), изучена реакционная способность твердых растворов с анионным замещением в системе $\text{Sb}_2(\text{Se,Te})_3$.

Кристаллы твердых растворов с содержанием селенида сурьмы 0–50 % синтезированы методом Бриджмена. При исследовании реакционной способности *ex situ* выявлено, что реакционная способность твердых растворов ниже, чем у чистого теллурида сурьмы. Как и для теллурида сурьмы, быстрее всего протекает окисление сурьмы, затем теллура. Селен окисляется в наименьшей степени. Напротив, при исследовании окисления *in situ* твердые растворы проявляют более высокую реакционную способность, хотя зависимость от состава не является монотонной. Это может свидетельствовать об ином механизме окисления, вызванном активацией кислорода фотонами при окислении *in situ*, что приводит к исчезновению барьера реакции и отсутствию индукционного периода в исследовании *in situ*.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-899.2018.3.

1. A.A. Volykhov, J. Sánchez-Barriga et al., J. Mater. Chem. C. 33, 6 (2018).

Обобщенная восприимчивость винтовой дислокации в окрестности сегнетоэластического фазового перехода

В. В. Дежин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

В данном исследовании, аналогично работам [1–3], рассмотрена винтовая дислокация с единичным вектором касательной к линии дислокации $\vec{\tau}_0 = (0, 0, -1)$, вектором Бюргера $\vec{b} = (0, 0, b)$ и единичным вектором нормали к плоскости скольжения $\vec{n} = (1, 0, 0)$. Дислокация располагалась вдоль оси Oz . Ограничивались случаем малых колебаний дислокации вблизи положения равновесия. В линейном по смещению дислокации $u = u(z, t)$ приближении найдена обратная функция линейного отклика винтовой дислокации в окрестности сегнетоэластического фазового перехода:

$$\alpha_D^{-1}(q_z, \omega) = \frac{\mu b^2}{4\pi} \int q_{\perp} dq_{\perp} \left\{ \frac{-q_z^2 + 3\omega^2/c_t^2}{q^2 - \omega^2/c_t^2} + \frac{2}{1-\nu} \frac{q_{\perp}^2 q_z^2 (1 + 2(1+\nu)\mu g^2 \eta_s^2 \tilde{\chi})}{(q^2 - \omega^2/c_t^2)(q^2 - \omega^2/c_l^2) - 4\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu g^2 \eta_s^2 \tilde{\chi}(q^2 - \omega^2/c_t^2)^2} \right\}.$$

Здесь q – волновой вектор, q_z – проекция волнового вектора на ось Oz , q_{\perp} – проекция волнового вектора на плоскость xOy , ω – частота колебаний, μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, g – постоянный стрикционный коэффициент, η_s – термодинамически равновесное значение параметра порядка, $\tilde{\chi}$ – фурье-образ функции отклика параметра порядка на гидростатическое давление p , c_t и c_l – скорости поперечных и продольных звуковых волн. Знание функции отклика позволяет записать дисперсионное уравнение и найти спектр изгибных колебаний винтовой дислокации. Также найдены добавки к эффективной массе и эффективной жесткости дислокации, дополнительный вклад в затухание дислокационных колебаний, проанализирована их зависимость от близости к температуре структурного фазового перехода.

1. Дежин В. В., Нечаев В. Н., Рошчупкин А. М. ФТТ. Т. 32, № 3. С. 810. (1990).
2. Dezhin V.V., Nechaev V.N., Roshchupkin A.M. Z. für Kristallographie. V. 193. P. 175 (1990).
3. Нечаев В. Н., Дежин В. В. Вестник Тамбовского ун-та. Сер.: Естеств. и технич. науки. Т. 21, вып. 3. С. 1188 (2016).

Моделирование зарядового упорядочения в купратных сверхпроводниках и его влияния на спектр делокализованных носителей заряда

А. Х. Джантемиров, А. Э. Мясникова

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

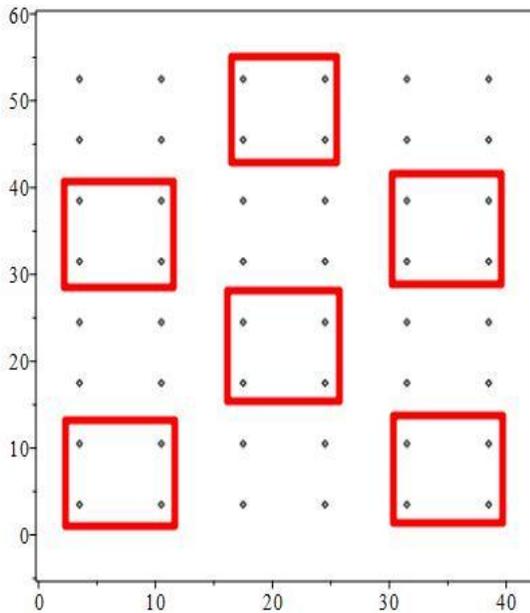


Рис. 1. Упорядочение автолокализованных состояний (биполяронов) “checkerboard”.

На рисунке в квадраты заключены дырочные биполяроны, остальные – электронные биполяроны. Точками обозначены наиболее вероятные положения носителей заряда в биполяронах

Теоретическое обоснование высокотемпературной сверхпроводимости является одной из наиболее актуальных задач современной физики твердого тела.

В данной работе исследуется зарядовое упорядочение, являющееся следствием существования автолокализованных состояний носителей заряда. Установлено, что наиболее энергетически выгодным расположением автолокализованных носителей заряда является расположение “checkerboard” [1] (рис. 1).

Исследовано влияние существования зарядового упорядочения на спектр делокализованных носителей заряда. Результаты моделирования указывают на возникновение запрещенных зон в спектре делокализованных носителей заряда (рис. 2). Полученный результат можно связать с т. н. псевдощелью [2], возникающей в высокотемпературных сверхпроводниках.

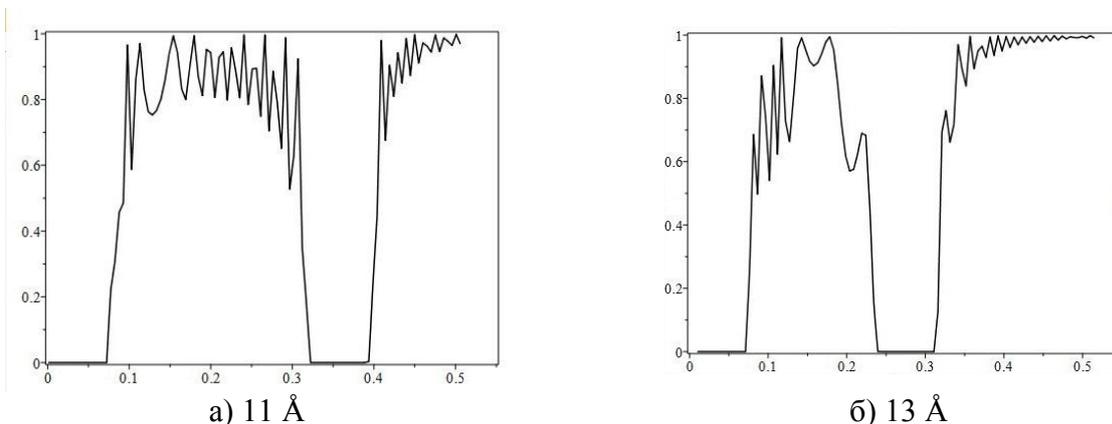


Рис. 2. Зависимости вероятности прохождения делокализованных носителей заряда от их энергий для разных периодов зарядового упорядочения: 11 Å и 13 Å

1. R. Comin et al., Nature Materials 14, 796–800 (2015).
2. Z.-X. Shen et al., New J. Phys. 12 105008 (2010).

Синтез и температурные изменения свойств наночастиц магнетита

К. Егизбек¹, А. Л. Козловский²

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

В последние десятилетия исследование металлических наночастиц является одной из ведущих областей материаловедения. Особенное внимание вызывают наночастицы магнетита (Fe_3O_4), которые обладают рядом перспективных свойств, отличающих их от макроматериалов, что позволяет применять их в наномедицине для адресной доставки лекарств, визуализации объектов и тканей *in vivo in vitro* методом МРТ, лечения онкологических заболеваний, при гипертермии злокачественных образований, а также в электрических аккумуляторах [1]. Наночастицы магнетита используются для фармакокоррекции анемических состояний, так как железо входит в состав крови [2].

В данной работе представлены результаты синтеза термического отжига наночастиц магнетита. Полученные результаты показали, что увеличение температуры отжига приводит к изменению массы и элементного состава синтезированных наночастиц. Согласно данным энергодисперсионного анализа, при температуре обработки 400–500 °С увеличивается содержание железа в образцах, после чего наблюдается резкий спад концентрации железа и увеличение концентрации кислорода, что свидетельствует о фазовых и структурных превращениях наночастиц в процессе отжига.

1. Magdalena, A.G. et al. “EDTA-functionalized Fe_3O_4 nanoparticles”. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 113 (2018): 5–10.
2. Vinodha, G. et al. “Synthesis, Characterization, Thermal Conductivity and Rheological Studies in Magnetite-Decorated Graphene Oxide Nanofluids”. *Journal of Nanofluids* 7.1 (2018): 11–20.

Синтез наночастиц на основе оксида железа покрытых PVP

А. Е. Ермакова^{1, 2}, Д. Ж. Тулебаева^{1, 2}, А. Л. Козловский², М. В. Здоровец²

¹ *Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

² *Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, Астана, Казахстан*

Магнитные наночастицы, в особенности Fe_3O_4 , наиболее интересны среди прочих ввиду их привлекательных свойств и широкому спектру применения в различных областях. Помимо этого, магнитные наночастицы обладают огромной поверхностной энергией и сильными магнитными взаимодействиями между частицами, что приводит к тому, что они в большей степени подвержены неконтролируемой агрегации в обычных условиях приготовления. Стабилизация может быть достигнута электростатическим и стерическим отталкиванием. Покрытие частиц ионными соединениями усиливает электростатическое отталкивание при приближении двух частиц, что обеспечивает более эффективную стабилизацию.

В данной работе представлен синтез наночастиц на основе оксида железа, стабилизированные поливинилпирролидоном (PVP). Исследование структуры и морфологии получения наночастиц проводили на сканирующем электронном микроскопе Hitachi TM3030 с системой микроанализа Bruker XFlash-MINSVE при ускоряющем напряжении 15 кВ. Рентгеновские измерения проводились на дифрактометре D8 ADVANCE с использованием излучения рентгеновской трубки с медным анодом и монохроматором с графитовым дифрагированным пучком. Мессбауэровские исследования проводились с использованием спектрометра MS1104Em, работающего в режиме постоянного ускорения с треугольным режимом доплеровской скорости источника относительно абсорбера. В качестве источника использовались ядра ^{57}Co в матрице Rh. Мессбауэровский спектрометр калибровали при комнатной температуре с использованием стандартного поглотителя $\alpha-Fe$.

The elastic constant of TlInSe₂

Н. А. Исмайлова

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

The ternary compound TlInSe₂ belongs to the group of semiconductors with chain crystal structure often called in literature as (B37) TlSe type. Elastic properties play a vital role to describe the nature of forces in solids. These properties provide useful information concerning the structural stabilities, bonding characteristics, anisotropic character of binding and the stiffness of crystals. The computations have been performed using the density-functional theory (DFT) [1] within the local-density approximation (LDA) [2] with the Perdew-Zunger parameterization [3]. The Tl-6s² 6p¹, In -5s²5p¹ and Se -3s²3p⁴ electrons have been treated as a valence electrons. The electron-ion interactions were taken into account through norm-conserving Fritz Haber Institute (FHI) pseudo potentials. The single-particle Kohn-Sham [5] wave functions were expanded in a linear combination of numerical real-space atomic orbitals as basis set with a kinetic energy cutoff of 300 Ry. Primitive cell was optimized with force and stress tolerances 10⁻⁴ eV/Å and 10⁻⁴ GPa correspondingly.

The elastic tensor C_{ij} is determined by performing six finite distortions of the lattice and deriving the elastic constants from the strain-stress relationship. Calculated 6 elastic constants C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{66} , C_{12} , C_{13} for tetragonal structure of TlInSe₂ with previous experimental and theoretical result are given in table 1.

It can be seen from table that value of C_{33} elastic constant is bigger than other constants, which indicating that the c axes of tetragonal phases are harder to be compressed than the other directions.

Our result in good agreement with experimental [4] result. Only one elastic constant C_{13} in ambient pressure is different from experimental one.

C_{ij}	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{66}
P=0GPa	59.82	22.07	30.03	84.56	15.92	13.87
Exp. [4] TlInSe ₂	42.11	12.59	8.93	83.54	11.88	11.24

1. P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. B136 864 (1964).
2. W. Kohn and L. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation Effects, Phys. Rev., 140 A1133 – A1138 (1965).
3. J.P. Perdew and A. Zunger. Phys. Rev. B, 23, 5048 (1981).
4. Martynyuk-Lototska, O. Mys, A. Say, I. Trach, D. Adamenko, O.O. Gomonnai, I. Roman & R. Vlokh, Phase Transitions, 92, 23–35 (2018).

Влияние размеров зерен на теплопроводность наноструктурированных экструдированных образцов твердого раствора $\text{Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_3$

Х. И. Исмаилова¹, Б. Ш. Бархалов^{1,2}, Р. М. Исмаилов¹

¹ Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

² Институт физики им. Г. М. Абдуллаева НАНА, Баку, Азербайджан

Представленная работа посвящена исследованию влияния размеров зерен на теплопроводность наноструктурированных экструдированных образцов твердого раствора $\text{Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_3$. Образцы были изготовлены из порошков синтезированного материала с размерами зерен 12, 19, 40 и 50 нм, полученных измельчением в планетарной шаровой мельнице марки АГО-2У.

Выявлено, что теплопроводность исследованных образцов зависит от размеров зерен исходного порошка, использованного для изготовления образцов – с уменьшением размеров зерна значение коэффициента теплопроводности χ уменьшаются.

Для выяснения влияния на механизм теплопроводности образцов температуры и размера зерен нами были вычислены решеточные χ_p и электронные χ_e составляющие коэффициента теплопроводности и оценены их вклады в общую теплопроводность. Результаты вычислений показали, для всех исследованных образцов в интервале температур 90–300 К доля электронной составляющей коэффициента теплопроводности χ_e не превышает 1 % от общей теплопроводности, что свидетельствует в пользу того, что снижение общей теплопроводности с уменьшением размеров зерен связано с уменьшением решеточной теплопроводности. При этом, чем меньше размеры кристаллитов (зерен), тем больше вероятность рассеяния фононов на дефектах и на границах, и тем меньше значение теплопроводности.

Влияние температуры отжига на фазовое состояние перовскитных систем на основе Fe_3O_4 и CeO_2

Д. А. Мустахиева¹, А. Л. Козловский², М. В. Здоровец²

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, Астана, Казахстан

Одной из важных проблем современного материаловедения является разработка новых материалов с заданными свойствами. Оксидные соединения со структурой перовскита зарекомендовали себя в качестве нового материала, обладающего множеством физико-химических свойств. Среди перовскитных систем чаще всего выделяют материалы с диэлектрическими, магнитными и проводящими свойствами, которые нашли широкое применение не только в технике, но и в современной энергетике [1]. Разнообразие перовскитных соединений обусловлено большой гибкостью структуры по отношению к различным изменениям модификации состава. В настоящее время соединения со структурой стехиометрического состава ABO_3 хорошо изучены, однако, создание материалов на практике значительно отличается от идеальных структур перовскита. Варьируя дефектами, которые могут быть искусственно созданы при замещении А и В катионов в кристаллической структуре, можно получить уникальные свойства, что способствует использованию перовскита оксидных соединений в различных областях [2]. Таким образом, изучение перовскитных систем с различным составом и методами модификации является актуальной задачей как в научном, так и в техническом применении.

В работе представлены результаты исследования изменения структуры перовскитной системы на основе Fe_3O_4 и CeO_2 от температуры отжига. После механического перетирания металлических порошков в пропорции 1:1, 1:2, 2:1, 1:3 и 3:1 проводился термический отжиг в диапазоне температур 600 °С, 800 °С, 1000 °С в течение 5 ч, в муфельной печи Nubertherm LE/11/r6.

На основе полученных данных методами РСА, РЭМ, ЭДА установлены зависимости изменения кристаллографических и морфологических характеристик от температуры отжига. Установлено, что в результате отжига наблюдается формирование примесных фаз Fe_2O_3 и CeFeO_3 , приводящей к увеличению параметров кристаллической решетки, что свидетельствует о формировании стабильной фазы в структуре. ЭДА свидетельствует о том, что с увеличением температуры отжига наблюдается уменьшение концентрации Се и Fe и возрастание концентрации O_2 . Также с увеличением в составе Fe_3O_4 размеры границ зерен увеличиваются, о чем свидетельствуют микроснимки с растрового электронного микроскопа. Представлены микроснимки морфологии полученных образцов различных концентраций, прошедших отжиг при высоких температурах.

1. Menesklou W. et al. High temperature oxygen sensors based on doped SrTiO_3 // Sensors and Actuators B: Chemical. 1999. № 2–3 (59). С. 184–189.
2. Pena M.A., Fierro J.L.G. Chemical structures and performances of perovskite oxides // Chem. Rev. 2001. (101). С. 1981–2017.

Электрон-фононное взаимодействие в стыках квантовых нитей

Р. А. Ниязов¹, П. А. Носов^{1, 2}, Д. Н. Аристов^{1, 2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

В результате непрерывного процесса миниатюризации электроники возникает необходимость учета эффектов размерного квантования: при достаточном сильном ограничении исходно трехмерного объекта по двум пространственным измерениям возникают одномерные системы – квантовые нити. Электроны в таких системах перестают описываться в рамках модели Ферми-жидкости, и влияние межэлектронного взаимодействия становится ключевым. Это приводит к перенормировке коэффициента прохождения системы: при наличии в квантовой нити примеси произвольной силы, коэффициент прохождения электронов через нее стремится к нулю степенным образом [1].

Однако, в твердом теле электроны взаимодействуют не только друг с другом, но и с атомами в решетке. Это приводит к электрон-фононному взаимодействию, вклад которого в перенормировку коэффициента прохождения примеси имеет противоположный знак относительно межэлектронного взаимодействия [2].

В данной работе был рассмотрен случай туннельной геометрии (стык типа Т): к квантовой нити с межэлектронным взаимодействием и фононами подводится зонд, из которого электроны могут туннелировать в квантовую нить. Известно, что в отсутствие взаимодействия с фононами перенормировка приводит к полному разрыву контакта [3]. Наличие этого взаимодействия приводит к тому, что в определенной области параметров характер стационарных точек меняется: происходит только «отрыв» зонда, а прохождение в квантовой нити становится идеальным.

Кроме того, в работе обсуждаются неравновесные эффекты и влияние взаимодействия на коэффициенты прохождения фононами через систему.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00424.

1. D. Yue, L.I. Glazman, K.A. Matveev, PRB 49, 1966 (1994).
2. A. Galda, I.V. Yurkevich, I.V. Lerner, PRB 83, 041106(R) (2011).
3. D. Aristov, P. Wölfle, PRB 88, 075131 (2013).

Индукцированная корреляциями Андерсоновская локализация

П. А. Носов^{1, 2, 3}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany*

Андерсоновский локализационный переход играет значительную роль в физике неупорядоченных систем, многочастичной локализации и квантовой информатике. Недавние эксперименты по его реализации в системах ультрахолодных атомов в оптических ловушках с дальнедействующим диполь-дипольным взаимодействием приводят к необходимости установления критериев локализации и нарушения эргодичности в неупорядоченных квантовых системах с интегралами перескока, спадающими с расстоянием степенным образом.

В данной работе показано, что наличие дальнедействующих интегралов перескока не является достаточным условием делокализации, несмотря на расходящееся число резонансов [1]. Интерференция путей с дальними коррелированными прыжками существенно изменяет фазовую диаграмму и может приводить к локализации почти всех собственных состояний или образованию неэргодической фазы. При этом системы с полностью детерминистическими полиномиальными интегралами перескока и диагональным беспорядком образуют новый класс универсальности, для которого типичные состояния всегда локализованы.

Кроме того, введен новый класс трансляционно-инвариантных моделей, являющийся промежуточным звеном между моделями с полностью некоррелированными и детерминистическими дальнедействующими интегралами перескока. Для данного класса показано существование слабо эргодической фазы и соответствующей иерархии переходов между фазами с разной степенью эргодичности. Также представлено аналитическое доказательство локализации и дуальности в степени спадания волновых функций в модели с детерминистическими полиномиальными интегралами перескока, недавно обнаруженной численными методами [2].

1. P.A. Nosov, I.M. Khaymovich, V.E. Kravtsov, arXiv:1810.01492 (2018).

2. X. Deng, V.E. Kravtsov, et al., Phys. Rev. Lett. 120, 110602 (2018).

Адсорбционные свойства поверхности во внешних электрическом и магнитном полях

А. К. Нухов^{1, 2}, Г. М. Мусаев³

¹ *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Москва, Россия*

² *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

³ *Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

Влияние электрического и магнитного полей на состояние поверхности с адсорбированными атомами может быть выражено в изменении уровней поверхностной энергии [1, 2].

Мы провели расчет числа заполнения для системы $Na/Ni(110)$ в зависимости от расстояния, приложенного электрического поля, длины электронного отклика и эффектов корреляции.

Произведенный нами расчет числа заполнения $n_a^{\pm\sigma}$ соответствующих уровней энергии $E_a^{\pm\sigma}$ при $S_0 = 0.987 \text{ \AA}^0$ для различных значений приложенного электрического поля как функции внешнего поля показывает резко выраженные пики, как на расстоянии $S = 30 \text{ \AA}^0$, так и при $S = 0$. Из этого расчета следует, что число заполнений $n_a^{\pm\sigma}$ уменьшается для всех расстояний с ростом приложенного поля. Однако величина плотности состояний адатома уменьшается с увеличением приложенного поля на поверхности, где решения являются немагнитными ($n_a^{\sigma} = n_a^{-\sigma}$) независимо от того существует поле или нет.

Можно сделать вывод, что ионный вклад в энергии хемосорбции E_{CH} (в энергию связи) преобладает при всех значениях приложенного поля, и этот вклад возрастает с ростом приложенного поля, в отличие от металлического вклада.

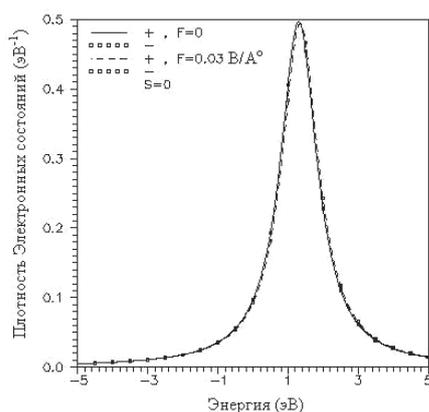


Рис. 1. Плотность состояний адатомов на поверхности ($S = 0$)

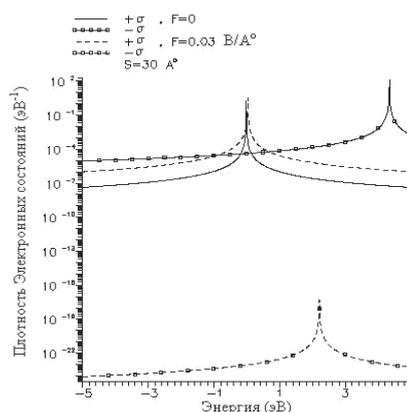


Рис. 2. Плотность состояний адатомов на расстоянии ($S = 30 \text{ \AA}^0$) от поверхности

1. Tsong T.T. Experimental studies of behavior of single adsorbed atoms on solid surfaces // Rep. Progr. Phys. 1988. Vol. 51. № 6. P. 759.
2. З. З. Алисултанов, Р. П. Мейланов, А. К. Нухов. О роли дефектов кристаллической решетки в формировании адсорбционных свойств графена. Письма в ЖТФ, том 39, вып. 3, 2013, С. 63–71.

**Метод многоканального многократного рассеяния
в формализме функции Грина:
 $L_{2,3}$ -поглощение рентгеновского излучения в $3d$ -соединениях**

Д. С. Рубаник, Д. О. Сопин, А. И. Таранухина, А. А. Новакович

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Рентгеновские $L_{2,3}$ -спектры поглощения позволяют исследовать симметрию, электронные состояния и химическую связь ионов переходных металлов. Для таких исследований необходимы теоретические методы, учитывающие корреляции $3d$ электронов в основном и возбужденном состояниях. Описание возбужденного состояния требует учета возмущения, вносимого электромагнитным излучением в электронную систему, одним из главных эффектов которого являются электрон-дырочные корреляции, которые приводят к радикальной перестройке спектров по сравнению со спектрами, рассчитанными в одноэлектронных подходах. Развитие неэмпирических методов, позволяющих в *едином* подходе рассчитывать как мультиплетные эффекты, так и эффекты многократного рассеяния фотоэлектронов в веществе, таких например как метод на основе уравнений Бете-Солпитера [1] и две версии методов многоканального многократного рассеяния: MCMS-GF в формализме функции Грина прямого пространства [2] и MCMS на основе R-матрицы Вигнера [3], позволило успешно описать $L_{2,3}$ -спектры для соединений, содержащих ионы с формальной электронной конфигурацией $3d^0$.

Данная работа выполнена с целью исследования применимости развитого нами метода MCMS-GF для моделирования L -поглощения в $3d$ соединениях с электронной конфигурацией $3d^N$. В качестве примера рассчитаны $L_{2,3}$ -спектры ванадия, кобальта и железа в VF_3 ($3d^2$), CoF_2 ($3d^7$) и Fe_2O_3 ($3d^5$). Сравнение и хорошее согласие с экспериментом показали, что проявление многоэлектронных корреляций в рассмотренных спектрах связано в основном с электрон-дырочными корреляциями и что метод MCMS-GF позволяет в ряде случаев анализировать спектры $3d$ соединений с учетом только данного типа взаимодействий.

*Работа выполнена в рамках реализации госзадания Минобрнауки РФ,
проект 3.5398.2017/8.9.*

1. E.L. Shirley, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., v. 144, 1187 (2005).
2. A. Taranukhina, A. Novakovich, C.R. Natoli, O. Šipr, Springer Proceedings in Physics, v. 204 (Multiple Scattering Theory for Spectroscopies, ed. by Sébilleau, D.K. Hatada, H. Ebert), 171–196 (Springer, Switzerland 2018).
3. P. Krüger, Springer Proceedings in Physics, v. 204 (Multiple Scattering Theory for Spectroscopies, ed. by Sébilleau, D.K. Hatada, H. Ebert), 143–169 (Springer, Switzerland 2018).

Исследования поперечного среза гексагональных включений Ge в структуре Ge/Si(001)

*А. А. Сушков, Д. А. Павлов, Н. О. Кривулин,
Р. И. Муртазин, Е. С. Кочугова, К. Р. Мухаматчин*

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

Создание эффективных светоизлучающих структур на подложке кремния до сих пор остается актуальной задачей. В последнее время интерес вызвали гексагональные фазы алмазоподобных полупроводников: Si и Ge [1]. Теоретические расчеты указывают, что политип 9R-Ge (доля гексагональности 2/3) обладает прямозонной структурой [1]. В связи с этим возникает задача получить и исследовать оптические свойства 9R-Ge на подложке Si.

В работе исследовалась кристаллическая структура слоя Ge на подложке Si(001). Для роста Ge применялась молекулярно-пучковая эпитаксия. Исследование поперечного среза структур осуществлялось на высокоразрешающем просвечивающем электронном микроскопе (ВРПЭМ) JEM-2100F (200 кВ).

На ВРПЭМ-изображениях в режиме фазового контраста поперечного среза структуры Ge/Si(001) в слое Ge обнаружены области с высокой концентрацией дефектов упаковки. Расшифровка этих областей на ВРПЭМ-изображениях с помощью расчета межплоскостных расстояний в направлении типа [111], а также дифрактограмм указывает на политип 9R. Фазовый контраст, смоделированный с использованием элементарной ячейки 9R, совпадает с полученным на ВРПЭМ. Это подтверждает правильность расшифровки гексагонального политипа.

Формирование гексагональной фазы алмазоподобных полупроводников в процессе гетероэпитаксии является новым почти не изученным подходом для решения актуальной проблемы интеграции светоизлучающих структур со стандартной кремниевой технологией. Пока однозначно непонятны условия формирования такой фазы, как на него влияют ориентация подложки, рассогласование параметров решеток, температура роста и прочие параметры гетероэпитаксиальных процессов – ответы на эти вопросы предстоит выяснить. На данный момент существует лишь возможность получения включений 9R-Ge на подложке Si(001).

1. A.A. Nikolskaya, D.S. Korolev et al., Appl. Phys. Lett. 113, 182103 (2018).

Изотермическая сжимаемость $TlGdX_2$ (X-S, Se, Te)

А. Ф. Талыфлы, Д. Д. Байрамов, Х. В. Алигулиева

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

По экспериментальным данным о коэффициента изотермической сжимаемости вычислены некоторые упругие параметры: модуль Юнга (E), коэффициент Пуассона (σ) и модуль сдвига (μ) в кристаллической решетке $TlGdS_2$, $TlGdSe_2$ и $TlGdTe_2$. Выявлено, что при переходе от сульфида к селениду и теллуриду упругие параметры E и σ увеличиваются, а μ уменьшается, что объясняется увеличением степени ионности химической связи в данном ряду.

Для измерения всестороннего сжатия $TlGdX_2$ (X-S, Se, Te) в интервале $77 \div 420$ К использовали установку, описанную в. С целью увеличения точности измерения частоты синусоидальных сигналов с разными помехами в регистрационной схеме использовали триггер Шмидта в интервальном исполнении. Установку градуировали по сжимаемости эталонных образцов меди и алюминия. Для сжатия образца применяли гелиевый газ, давление которого варьировали от 10^5 Па до 10 МПа.

Результаты исследований температурной зависимости изотермической сжимаемости (χ_T) для $TlGdS_2$, $TlGdSe_2$ и $TlGdTe_2$ показаны на рисунке. Как видно из рисунка ход кривых для $TlGdS_2$ и $TlGdSe_2$ почти одинаков, т. е. во всем температурном интервале значения (χ_T) монотонно растут при увеличении температуры. Такое поведение (χ_T) в $TlGdS_2$ и $TlGdSe_2$ объясняется идентичностью типов кристаллической структуры и химических связей между атомами.

Сравнение температурных зависимостей (χ_T) показало, что во всем исследованном интервале температур значение (χ_T) для $TlGdTe_2$ по величине больше, чем для $TlGdS_2$ и $TlGdSe_2$. Это, по-видимому, связано с изменением химических связей, а так же различием в кристаллической структуре указанных соединений и это приводит к изменению типа химической связи и кристаллической структуры. Это свидетельствует о том, что в данном ряде не происходит фазового превращения.

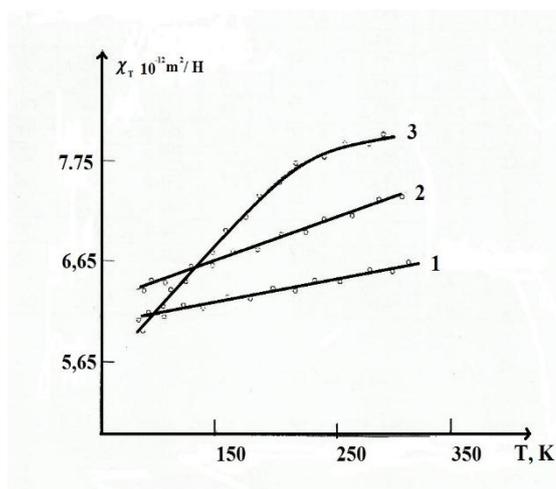


Рис. Температурные зависимости изотермических сжимаемостей соединений: 1 – $TlGdS_2$; 2 – $TlGdSe_2$; 3 – $TlGdTe_2$

Основное состояние кирального гелимагнетика под действием растягивающего напряжения: модель двойного синус-Гордона

А. А. Терещенко¹, А. С. Овчинников^{2, 1}, Вл. Е. Сеницын¹

¹ *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Исследование физических свойств одноосных киральных гелимагнетиков, спиральный магнитный порядок в которых обусловлен антисимметричным взаимодействием Дзялошинского – Мория, является одним из перспективных направлений современного магнетизма. Среди причин повышенного интереса к геликоидальным системам и их потенциального применения в спинтронике является относительная легкость управления магнитного порядка внешними воздействиями. Например, совместное действие внешнего магнитного поля и механических напряжений способно приводить к значительной перестройке основного состояния в виде магнитной солитонной решетки. К сожалению, этот эффект остается малоизученным, хотя и представляет несомненный практический интерес.

Анализ задачи о деформации солитонной решетки одноосным растягивающим напряжением, приложенным перпендикулярно геликоидальной оси, выполнен в рамках феноменологической теории. В этом подходе свободная энергия магнетика включает в себя обмен Гейзенберга, антисимметричный обмен Дзялошинского – Мория, зеэмановское и магнитоупругое взаимодействия, допускаемые симметрией кристалла.

Минимизация свободной энергии приводит к уравнению двойного синус-Гордона, которое ранее использовалось для анализа эффектов кристаллической анизотропии второго порядка в одноосных киральных гелимагнетиках [1, 2]. Его решение показывает существование двух пространственно-неоднородных фаз: фазы, в которой сохраняется поляризация намагниченности вдоль внешнего поля, и фазы «упакованной» структуры, в которой спины направлены под углом к внешнему полю. Построение фазовой диаграммы соответствующих решений и расчет их лоренцogramм позволили решить задачу об управлении фазой солитонной решетки совместным действием внешнего магнитного поля и одноосного растягивающего напряжения, а также идентификации найденных фаз в эксперименте. Полученные результаты могут служить основой для разработки спиновых клапанов на основе тонких пленок CrNb_3S_6 .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00769 мол_а и Фонда содействия развитию теоретической физики и математики BASIS 17-11-107.

1. Y.A. Izyumov, Physics Uspekhi. 27, 11 (1984).
2. S. Iwabuchi, Progress of theoretical physics 70, 4 (1983).

Сравнительное теоретическое исследование состояний «скирмионный кристалл» и «тройная спираль» в магнетиках без центра инверсии

В. Е. Тимофеев^{1, 2, 3}, Д. Н. Аристов^{1, 2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

В последние годы объектом активных теоретических и экспериментальных исследований являются топологически нетривиальные спиновые структуры, называемые скирмионными кристаллами [1]. В экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов в скирмионной фазе наблюдаются шесть ярко выраженных пиков, поэтому зачастую скирмионный кристалл отождествляется с «тройной спиралью», т. е. суперпозицией трех простых спиралей, векторы которых направлены под углами в 120° [2]. В то же время, структуры тройной спирали и скирмионного кристалла математически неэквивалентны, и можно ожидать, что ряд наблюдаемых в подобных объектах существенно отличаются.

Мы рассматриваем стандартную двумерную непрерывную модель ферромагнетика с взаимодействием Дзялошинского – Мория в присутствии внешнего магнитного поля. Уравнения, описывающие устойчивые конфигурации спинов, существенно нелинейны и требуют численного анализа в рамках определенных приближений. Мы изучаем несколько возможных конфигураций намагниченности, отвечающих плотной упаковке скирмионов [3] и различным реализациям тройной спирали. В случае нулевой температуры величина вектора намагниченности постоянна в пространстве, это позволяет корректно сравнивать топологические свойства различных конфигураций.

Для различных конфигураций производится сравнение классических энергий, а также вычисляются тензоры магнитной восприимчивости. Результаты анализа позволяют выявить различия между состояниями скирмионного кристалла и тройной спирали.

1. Yu X.Z. et al. Nature 465, 901 (2010).

2. Mühlbauer S. et al. Science 323, 915 (2009).

3. В. Е. Тимофеев и др. Письма в ЖЭТФ 109, 200 (2019).

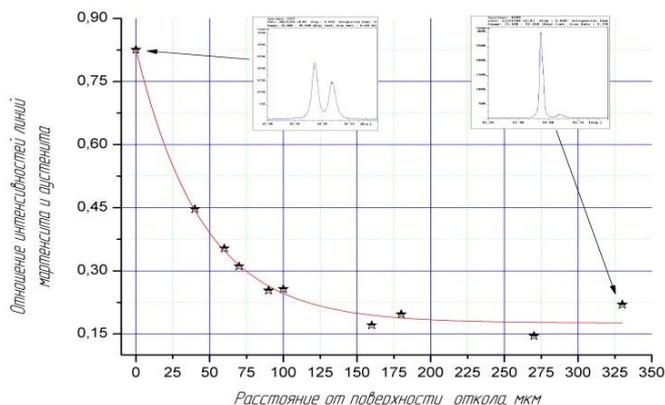
Распределение мартенсита деформации вблизи поверхности откола после ударно-волнового нагружения нержавеющей стали 12X18H10T

К. Г. Топорищев, И. Л. Святков, А. Е. Шестаков, А. В. Павленко

*Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики
им. акад. Е. И. Забабахина, Снежинск, Россия*

Сталь 12X18H10T широко применяется в РФЯЦ-ВНИИТФ. Сочетание механических характеристик стали, таких как прочность, пластичность и ударная вязкость, ее технологичность (свариваемость, коррозионная стойкость, и т.п.) делают ее весьма привлекательной при изготовлении ампул для хранения и испытания токсичных и делящихся материалов. Данная сталь активно использовалась во взрывных экспериментах.

Работа выполнена с целью выявления на микроуровне изменений в стали 12X18H10T происходящих при ударно-волновом нагружении (УВН).



Изложены результаты рентгенографического исследования распределения мартенсита деформации в образцах из нержавеющей стали 12X18H10T претерпевших откол при ударно-волновом нагружении. Для исследования распределения содержания мартенсита по глубине выбранного образца был проведен послойный рентгеноструктурный анализ со стороны откола. Обнаружена локализация мартенсита деформации вблизи поверхности откола. Сделаны оценки толщины слоя, в котором происходит локализация.

1. Гольдштейн М. И., Грачев С. В., Векслер Ю. Г. Специальные стали. Учебник для вузов. М.: Металлургия, 1985, 408 с.
2. Шаскольская М. П., «Кристаллография», Высшая школа. Второе издание, перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1984. – 376 с.
3. А. Гинье. «Рентгенография кристаллов», теория и практика. Перев. с французского Е. Н. Беловой, С. С. Квитки, В. П. Тарасовой под ред. академика Н. В. Белова. Гос. изд. физ-мат. литературы. Москва 1961, 604 с.
4. Г. Липсон, Г. Стипл. «Интерпретация порошковых рентгенограмм». Перевод с английского Е. Н. Беловой и Г. П. Литвинской под ред. Н. В. Белова. Издат. «МИР» Москва 1972.

Кубические спиральные магнетики типа В20 с беспорядком в магнитном поле

О. И. Утесов^{1, 2}, А. В. Сыромятников^{1, 3}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Отсутствие центра инверсии в магнетиках может приводить к длиннопериодическим спиральным структурам. Несмотря на то, что спиральное упорядочение было предсказано и экспериментально обнаружено достаточно давно, такие вещества вызывают значительный интерес и в настоящее время, благодаря характерной для них сложной фазовой диаграмме.

Смешанные соединения, например $Mn_{1-x}Fe_xGe$, проявляют ряд интересных свойств [1]. При изменении концентрации примеси меняется вектор спирали, для некоторого значения x_c он обращается в ноль. Концентрация x_c также разделяет области разной магнитной киральности.

Для описания таких систем при малых x , когда примеси можно считать дефектами, в работе [2] была предложена модель разупорядоченного спирального магнетика, с измененными параметрами взаимодействия между некоторыми спинами в системе.

В данной работе мы рассмотрели поведение такой системы во внешнем магнитном поле. Было показано, что результаты работы [2] для кубических спиральных магнетиков применимы в спиральной фазе при произвольной ориентации спирали. В конической фазе оказалось, что искажения спирали одним дефектом описываются двумя уравнениями. Для компоненты спина в плоскости спирали дополнительный поворот спина описывается уравнением Пуассона для поля диполя, вне плоскости – экранированным уравнением Пуассона, с длиной экранировки порядка периода спирали. При конечных малых концентрациях дефектов это приводит к поправкам к величине вектора спирали и к коническому углу, пропорциональным концентрации дефектов. Изменение вектора спирали за счет дефектов оказалось не зависящим от величины магнитного поля. В недавних экспериментальных работах [3, 4] измерялась зависимость вектора спирали в $Mn_{1-x}Fe_xSi$ при малых x , которая оказалась линейной, что лежит в согласии с результатами данной работы.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00083.

1. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. Lett. 110, 207201 (2013).
2. O.I. Utesov, A.V. Sizanov, and A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B 92, 125110 (2015).
3. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. B 97, 024409 (2018).
4. J. Kindervater et al., arXiv:1811.12379 (2018).

Электронная структура Gd-легированного топологического изолятора $\text{Bi}_{1.09}\text{Gd}_{0.06}\text{Sb}_{0.085}\text{Te}_3$

*С. О. Фильноев¹, И. И. Климовских¹, Д. А. Естюнин¹,
О. Е. Терещенко², А. М. Шикин¹*

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой объемные диэлектрики на поверхности которых локализованы проводящие состояния, обладающие топологической защищенностью и линейной дисперсией $E(k)$ – конусом Дирака [1].

Одним из основных векторов развития ТИ в настоящее время является изучение систем с индуцированным магнитным порядком, ввиду возможного обнаружения множества фундаментально значимых эффектов, таких как: топологический магнито-электрический эффект [2], квантовый аномальный эффект Холла [3], экспериментального обнаружения частиц Майораны [4] и др. Более того, на основе таких систем существует множество концептов построения устройств для использования в спинтронике и квантовой микроэлектронике, например, спинового транзистора [5] и ячейки квантовой памяти – кубита [6].

Признаком успешной организации магнитного порядка в ТИ является открытие небольшой запрещенной зоны между нижним и верхним конусами поверхностных состояний. Таким образом, изучая электронную структуру поверхностных состояний можно делать выводы о магнитных свойствах ТИ и возможности обнаружения в таких системах эффектов, описанных выше.

В данной работе с помощью метода фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и резонансной фотоэлектронной спектроскопии была изучена электронная структура магнитного топологического изолятора $\text{Bi}_{1.09}\text{Gd}_{0.06}\text{Sb}_{0.085}\text{Te}_3$.

1. M.Z. Hasan and C.L. Kane, Rev. Mod. Phys. 82, 4 (2010).
2. Takahiro Morimoto et al., Physical Review B 92, 085113 (2015).
3. Rui Yu et al., Science 329, 5987 (2010).
4. Qing Lin He et al., Science 357, 6348 (2017).
5. Matthias Götze et al., Scientific Reports 6, 36070 (2016).
6. J. Manousakis et al., Physical Review B 95, 165424 (2017).

Вычисление спектра магнонов на скирмионной решетке в базисе функций Ландау

А. В. Цыпильников², Д. Н. Аристов^{1, 2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Большой интерес со стороны как теоретиков, так и экспериментаторов, вызывают различные неколлинеарные магнитные структуры: магнитные стенки, спирали, циклоиды и других состояний, в частности, относительно недавно открытая в MnSi решетка, состоящая из закрученных магнитных вихрей [1], называемых скирмионами [2].

Неупругое рассеяние нейтронов на магнитной структуре определяется спектром магнонов. Для описания спектра магнонов в случае одного скирмиона успешно применяется метод ВКБ [3], причем в обменном приближении решение находится аналитически [4]. Однако, учет взаимодействия Дзялошинского – Мория и внешнего магнитного поля усложняет задачу, так как аналитическое выражение даже для профиля скирмиона в классическом пределе отсутствует. В большинстве теоретических работ результаты получаются в рамках численного моделирования [5, 6] используя различные вариации конечно-разностных методов или методов Монте-Карло, однако такой путь не очень удобен с точки зрения описания экспериментов по рассеянию.

В предложенном нами полуаналитическом подходе магноны описываются как частицы в присутствии периодического потенциала решетки скирмионов и неоднородного калибровочного поля, возникающего за счет нетривиальной топологии системы. Конечная плотность скирмионов делает задачу похожей на квантование Ландау для спектра частицы в постоянном магнитном поле. Эта связанная с топологией часть гамильтониана считается нами основной, а периодический потенциал рассматривается как возмущение. Мы строим матричное уравнение на спектр магнонов, используя базис собственных функций для уровней Ландау. Это позволяет нам получить не только спектр, но и волновые функции, разложенные по этому базису.

1. S. Mühlbauer et al., Science, 13, 915–919 (2009).
2. T. Skyrme, Nuclear Physics. 31, 556–569 (1962).
3. C. Schütte and M. Garst, Phys. Rev. B 90, 094423 (2014).
4. D.N. Aristov and P.G. Matveeva, Phys. Rev. B 94, 214425 (2016).
5. A. Roldán-Molina, A.S. Nunez and J. Fernández-Rossier, New J. Phys., 18, 045015 (2016).
6. F.N. Rybakov, A.V. Borisov, S. Blügel & N.S. Kiselev, New J. Phys., 18, 045002 (2016).

Теория низкотемпературной теплопроводности и теплоемкости осе-напряженных углеродных нанотрубок и композитных материалов на их основе

Д. В. Чалин

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Как известно, углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальными тепловыми свойствами [1]. Этим обуславливается постоянно растущий интерес к их применению в различных композитных материалах и одновременно теоретическому моделированию таких материалов.

Для адекватного описания низкотемпературных тепловых свойств подобных систем важно учесть, что в данных материалах нанотрубки всегда должны испытывать дополнительные осевые напряжения растяжения-сжатия в виду разницы коэффициентов теплового расширения УНТ и УНТ-содержащего материала. В то же время, так как основной вклад в теплоемкость и теплопроводность при низких температурах любой системы дают лишь низкочастотные моды, то для расчета частот мод осе-напряженных УНТ наиболее целесообразно использовать континуальный подход [2], в рамках которого индивидуальная нанотрубка описывается как упругая цилиндрическая мембрана, не обладающая макроскопической толщиной. Предлагаемая теория позволяет учесть, как возникающие осевые напряжения в УНТ, так и эффективное взаимодействие индивидуальной нанотрубки с ее окружением.

Анализ полученного фононного спектра осе-напряженных УНТ показывает, что наличие растягивающих/сжимающих напряжений практически никак не сказывается на низкочастотных модах нанотрубки с волновым вектором $k = 0$, но вместе с тем оказывает критическое влияние на остальные многочисленные низкочастотные моды, которые существенным образом определяют низкотемпературные физические свойства УНТ-содержащих композитных материалов. В данной работе показывается, что наличие осевых напряжений слабо влияет на низкотемпературную теплопроводность УНТ, однако в случае теплоемкости значительно меняется ее величина, а также изменяется сама температурная зависимость теплоемкости в области температур $T \rightarrow 0$.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-29-19043).

1. J. Hone, M.C. Llaguno, M.J. Biercuk, A.T. Johnson, B. Batlogg, Z. Benes, and J.E. Fischer, *Applied Physics A* 74(3), 339–343 (2002).
2. D.V. Chalin, M.V. Avramenko, and S.B. Rochal, *Phys. Rev. B* 96, 155413 (2017).

Получение массивов двухкомпонентных нанопроволок для генерации электромагнитных волн ТГц диапазона

А. С. Шаталов¹, Д. А. Черкасов¹, А. Ш. Асваров¹, В. М. Каневский¹,
Д. Л. Загорский¹, С. Г. Чигарев², И. Н. Дюжиков²

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

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

В последнее время большой интерес как исследователей, так и практиков, вызывают наноразмерные структуры, в частности массивы одномерных структур – металлических нанопроволок (НП). Часто такие структуры получают методом матричного синтеза, принцип которого заключается в электрохимическом (гальваническом) заполнении пор матрицы (темплата) металлом. Метод дает возможность получения, в частности, НП, состоящих из чередующихся слоев различных металлов. Такие структуры, включающие переходы между двумя магнитными представляют интерес для электроники и спинтроники. Известно, что контакт двух магнитных металлов может использоваться как излучатель электромагнитных волн. Принцип действия такого излучателя заключается в прохождении спин-поляризованного тока через границу различных ферромагнитных металлов. Поскольку равновесная поляризация и энергия электронов в металлах отличаются, протекание тока (спин-поляризованного в одном из металлов (инжекторе)) через такой переход приводит к возбужденному состоянию электронов. Релаксация последнего приводит к испусканию электромагнитного излучения, часто приходящегося на ТГц диапазон.

В настоящей работе для получения гетероструктурных НП применялся традиционный «однованный» метод, при этом использовался импульсный режим электроосаждения. Был успешно использован и «двухванный» метод, который заключается в последовательном росте двух разных металлов в двух разных электролитах: Получены массивы НП из комбинации металлов Ni/Co, Co/Ni, Ni/Fe и Fe/Co. Гетеропереходы были получены и другим методом: каналы трековых мембран полностью заполнялись металлом (инжектором), а на поверхность наносился тонкий слой другого металла (рабочий слой). При этом использовалось магнетронное нанесение металла, толщина которого должна быть достаточной для пропускания тока высокой плотности и в тоже время слой должен быть прозрачным для ТГц излучения.

Излучательные характеристики полученных образцов были исследованы на двух приборах на оптоакустическом преобразователе (ячейка Голя-приемник излучения диапазон измерений: терагерцовое и ближнее ИК-излучение) и на Фурье спектрометре Vertex 80v при комнатной температуре. Получены спектры испускаемых электромагнитных излучений, показана возможность генерации электромагнитных волн в диапазоне 10–15 ТГц при мощности до 10 мкВт.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-29-11763 офи_м.

Study of the atomic structure of bimetallic PtCu “gradient” nanoparticles in the composition of PtCu/C electrocatalysts

*D.B. Sheme, V.V. Pryadchenko, V.S. Menshikov,
A.K. Nevelskaya, V.E. Guterman, L.A. Bugaev*

Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

Composite materials based on multicomponent platinum-containing nanoparticles are widely studied because they are promising catalysts for the electroreduction reaction of oxygen in low-temperature fuel cells. Platinum-containing nanoparticles are very promising due to high thermodynamic stability of platinum and due to specific chemical activity of this metal. However, the cost of pure platinum particle is one of the main factors restricting the wide application of low-temperature fuel cells. Such expenses can be decreased by using multimetal nanoparticles or non-platinum nanoparticles.

In this research, the platinum-copper bimetallic electrocatalyst with initial composition of Pt_{0.8}Cu/C was obtained by the methods of successive multistage reduction of platinum and copper from solutions of their precursors with a gradual increase in the concentration of atoms platinum in the mother solution. The composition and structural characteristics of this material were compared with the Pt_{0.1}Cu/C catalyst based on solid solution nanoparticles which was obtained by combined single-stage chemical precursor reduction.

Structural analysis was performed using Pt L₃- and Cu K- EXAFS spectra using the technique of determining local parameters of the structure of absorbing atoms that have a short-range environment consisting of Pt and Cu atoms. Based on the obtained structural data and on the composition of the investigated catalysts, the cluster models of PtCu nanoparticles are constructed, which demonstrate the features of the distribution of metal atoms in the volume of the “average” nanoparticle.

This work was supported by grants from the Russian Foundation for Basic Research № 18-32-00632 мол. а.

Рентгеноакустический дифрактометр для времяразрешающих *in situ* исследований деформационных процессов в кристаллических материалах

*В. И. Аккуратов^{1, 2}, Я. А. Элиович^{1, 2}, А. В. Таргонский^{1, 2}, А. Е. Благов^{1, 2},
Ю. В. Писаревский^{1, 2}, М. В. Ковальчук^{1, 2}*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

В настоящей работе приведено описание разработанного в ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и НИЦ «Курчатовский институт» рентгеноакустического дифрактометра, в котором требуемая для регистрации кривых дифракционного отражения (КДО) перестройка параметров пучка осуществляется с помощью изгибного пьезоактуатора [1], расположенного на месте монохроматора непосредственно после источника излучения. К ключевым преимуществам данного дифрактометра можно отнести возможность изучения быстропротекающих необратимых процессов с миллисекундным временным разрешением.

В работе рассматриваются несколько возможных реализаций прототипов устройств, обеспечивающих эффективную механическую и вибрационную нагрузку исследуемых кристаллов, которые могут размещаться на дифрактометре. Приведены результаты апробации предлагаемого подхода для исследования динамики дефектной структуры кристаллов кремния и фторида лития при внешних воздействиях [2]. Показано, что они эквивалентны результатам традиционного метода, основанного на использовании механических устройств прецизионного изменения угла.

Разработанный метод может быть эффективно использован для оперативной интегральной диагностики внутренних напряжений деформированных кристаллов в научно-исследовательских и производственных организациях, связанных с изготовлением и использованием микроэлектронных компонент и систем на основе кристаллических материалов.

Минимальное достигнутое время регистрации одной КДО составляет 1,5 с и как минимум на порядок превосходит возможности традиционных методов. Временное разрешение ограничивается относительно небольшой мощностью использованного лабораторного источника рентгеновского излучения и может быть увеличено при проведении исследований на источниках синхротронного излучения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 18-32-20108 мол_а_вед и №16-29-14057 офи_м.

1. А. Е. Благов, А. С. Быков и др., ПТЭ. 5, 109 (2016).

2. Я. А. Элиович, В. И. Аккуратов, и др., Кристаллография. 63, 5, 708 (2018).

Протон-дейтонная станция: формирование пучка

А. В. Гартвик, А. В. Ипатов, Ю. Г. Лукьянов, А. Ю. Лукьянов

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Станция функционирует на базе малого ионного ускорителя (электростатического генератора Ван де Граафа). Под формированием пучка в настоящей работе понимается его создание, обеспечение его интенсивности, очистка спектра и стабилизация энергии составляющих пучок ионов.

Создание пучка производилось посредством вытягивания ионов из плазмы. Описан способ получения плазмы, а также процесс подбора материала и формы вытягивающего электрода. Одновременно полученный электрод обеспечивал первичную фокусировку пучка.

Следующий этап фокусировки – коррекция формы сечения пучка на выходе из ускорителя. Приведены результаты тестового эксперимента с корректором.

Дополнительная фокусировка осуществлялась внутри ускорителя двумя крайними эквипотенциальными кольцами (№ 41 и № 42), при увеличении ускоряющего напряжения $U_{уск}$ до 900÷1000 кВ. Увеличение $U_{уск}$ стало возможным благодаря качеству высоковольтного изолятора – химически чистого газообразного азота. Приведены результаты проведенного химического анализа газа-изолятора и экспериментальная связь давления в газе с максимальным реализуемым значением $U_{уск}$.

Изучение состава пучка и отбор рабочей фракции ионов производились с использованием электромагнита (радиус магнита ~ 1 м) и сигнальных электропроводящих пластин, смонтированных в ионопровод. Приведены результаты определения состава пучка.

Осуществление фокусировки пучка обеспечивало, в свою очередь, успешное включение системы обратной связи очищенного пучка с источником ионов (через сигнальные пластины). Это приводило к стабилизации скорости частиц в пучке, то есть, при равной массе частиц, к стабилизации их кинетической энергии.

Посредством сформированного пучка был проведен тестовый эксперимент с эталонным образцом Al_2O_3 (80нм) / Al, принесший положительные результаты.

Современные газонаполненные позиционно-чувствительные детекторы тепловых нейтронов

Т. И. Глушкова, А. П. Кащук, В. А. Соловей, О. В. Левицкая

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Для регистрации тепловых нейтронов используются различные детекторные системы, среди которых наиболее популярны позиционно-чувствительные детекторы на основе газовых конверторов.

К наиболее известным типам таких детекторов относятся следующие:

MWPC (*Multi-Wire Proportional Chamber*) – многопроволочная пропорциональная камера, классический двухкоординатный детектор. Представляет собой систему многих тонких параллельных проволочек-анодов, находящихся в газовом объеме между двумя параллельными друг другу катодами (сплошными или проволочными). В качестве газа-конвертора часто применяют газы $^3\text{He}_2$, $^{10}\text{B}_5$.

MPGD (*Micro-Pattern Gaseous Detector*) – микроструктурный быстродействующий координатный детектор. Представляет собой тонкие параллельные металлические полоски, нанесенные на изолирующую подложку. Здесь можно выделить два класса:

1) GEM (*Gaseous Electron Multiplier*) – газовый электронный умножитель (ГЭУ), это тонкая каптоновая пленка, покрытая с обеих сторон фольгой с регулярной структурой отверстий диаметром от десятков до сотен мкм;

2) Micromegas (*Micro-Mesh Gaseous Structure*) – микросетчатая газообразная структура, это камера с газовым объемом, поделенным на две части металлической микросеткой, обеспечивающей быстрый съем сигнала.

MSGC (*Micro-Strip Gaseous Counter*) – микростриповый детектор. Конструкция разрабатывается на основе многослойного пленочного конвертора или пропорциональной камеры с анодными проволочками и пластинками в роли катодов. В качестве конвертора часто применяется карбид бора $^{10}\text{B}_4\text{C}$.

LPSD (*Linear Position Sensitive Detector*) – линейный однокоординатный позиционно-чувствительный детектор. Конструируется на основе тонкостенных дрейфовых трубок (straw) с центральной проволочкой – анодом, заполненных газом-конвертором ^3He или ^{10}B . На стенки трубок может дополнительно наноситься тонкопленочное покрытие.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, Соглашение № 075-02-2018-260 от 26.11.2018 г., уникальный идентификационный номер проекта RFMEFI60718X0200.

Применение оксидированных теплопроводящих элементов для косвенного охлаждения галетных обмоток соленоида из ВТСП-провода

А. Ю. Дегтяренко¹, В. В. Ворожцова², Е. П. Красноперов¹, С. В. Шавкин¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

В настоящее время в сверхпроводниковых магнитных устройствах все чаще применяют, так называемое, косвенное охлаждение при помощи криокулеров. В НИЦ КИ разрабатывается магнитная холодильная машина, в которой используется соленоид, изготовленный из галетных обмоток ВТСП провода. Соленоид смонтирован в криостате в вакуумном объеме и охлаждается с помощью двухступенчатого криокулера: 1-я ступень при $T = 50\text{--}60\text{ К}$; 2-я ступень до $T = 20\text{--}40\text{ К}$. Галетные обмотки охлаждаются пластинами из сплава АД1, которые имеют наибольшую теплопроводность среди алюминиевых сплавов. При этом необходимо электрически изолировать пластины от обмоток. Изолирующее покрытие Al_2O_3 на пластинах формировалось методом плазменно-электролитической обработки (ПЭО), который имеет следующие преимущества: низкие энергозатраты, экологически чистые электролиты, высокая адгезия покрытий к металлической основе, не требуется тщательная предварительная подготовка поверхности.

ПЭО проводилась в емкостной установке [1]. При проведении процессов между электродами пропускался переменный ток с заданной плотностью 4 А/дм^2 в щелочном водном растворе ($\text{pH} \approx 13,1$), содержащем 10 г/л силиката натрия. Средняя толщина покрытия составила $d \approx 15\text{ мкм}$. Методом рентгеноструктурного анализа подтверждено наличие γ -фазы Al_2O_3 на Al . Было измерено пробивное напряжение покрытия, среднее значение которого составило $U_{\text{пр}} \approx 600\text{ В}$. Термоциклирование до T жидкого азота и давления на покрытие галетой 27 МПа (270 ат) не изменили диэлектрических свойств. Проведенные эксперименты показали, что разработанное покрытие из Al_2O_3 имеет однородную структуру и может быть использовано в теплопроводящих элементах косвенного охлаждения обмотки в сверхпроводящем электромагните из ВТСП провода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения № 14.604.21.0197 о предоставлении субсидии (уникальный идентификатор прикладных научных исследований RFMEFI60417X0197).

1. Rakoch A.G., Gladkova A.A., Zayar Linn, Strekalina D.M. The evidence of cathodic micro-discharges during plasma electrolytic oxidation of light metallic alloys and micro-discharge intensity depending on pH of the electrolyte // Surface and Coatings Technology. 2015. V. 269. P. 138–144.

Субпиксельная точность для квадратной и треугольной решеток

А. О. Елохин, Т. Е. Романовская, И. Л. Жогин

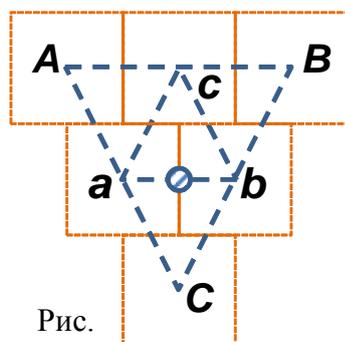
Инновационный центр «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

Рассматривается задача определения координат (и других параметров) особенностей пиксельного изображения, максимумов поглощения, рефлексов, и т. д., с точностью более высокой, чем размеры пикселей. С одномерным вариантом этой задачи связан алгоритм однокоординатного счетного рентгеновского детектора ОД-3М [1] (см. также задачу со спектральными бинами [2]).

Интенсивность сигнала в районе максимума [т.е. величину пикселя, если он помещен в точку (x, y)], можно описать, оставив квадратичные члены ряда:

$$f(x, y) = f_0 - p(x - u)^2/2 - q(y - v)^2/2 - r(x - u)(y - v); \quad (1)$$

начало отсчета можно выбрать в центре «главного» пикселя, с наибольшей интенсивностью; в точке (u, v) будет максимум, если $D = pq - r^2 > 0$. Шесть параметров ростка (1) можно найти, зная величины шести пикселей из компактного кластера (включающего главный). Для симметричных пятен, когда в (1) отсутствует перекрестный член, достаточно кластера из пяти пикселей, и на квадратной решетке имеется симметричный кластер из главного и четырех соседних пикселей. Прямоугольный кластер 2 x 3 не подходит, т. к. для нахождения вторых разностных производных (и параметров квадратичной формы) нужно иметь цепочки из трех пикселей вдоль соответствующего направления.



На треугольной решетке существует удобный, симметричный кластер из шести пикселей (квадраты 1 x 1), показанный на рисунке; пиксели малого и большого треугольников обозначены строчными и прописными буквами. Кружок отмечает выбранное начало отчета, середину границы между пикселями a, b ; т. е. $b = f(\frac{1}{2}, 0)$, $c = f(0, 1)$, и т. д. Сумма пикселей a, b, c должна быть максимальной.

Можно получить следующие выражения:

$$\begin{cases} p = 2c - A - B; & q = p/4 + b + a - c - C \\ r = b - a - (B - A)/2; & 2f_0 = a + b + \dots \end{cases}; \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{2D} \begin{pmatrix} 2q & -r \\ -2r & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b - a \\ c - C \end{pmatrix}.$$

Квадратную решетку можно преобразовать в (квази)треугольную с помощью биннинга, либо, если пятна малы и укрупнять пиксели плохо, путем введения, черезстрочно, вспомогательных, средних (соседние пары) пикселей.

1. V.M. Aulchenko, O.V. Evdokov et al., Nucl. Instr. and Methods. A603, 76 (2009).
2. И. Л. Жогин, А. Ю. Коржов, Т. Е. Романовская и др. IV Всерос. научно-практ. конф. производителей рентгеновской техники. СПб: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2017, с. 19–24; см. также x-ray-conf.ru/Itogovy_sbornik_2017.pdf

Протон-дейтронная станция: увеличение ресурса вакуумной системы

А. В. Гартвик, А. В. Ипатов, Ю. Г. Лукьянов, А. Ю. Лукьянов

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Проведение тестовых экспериментов на протон-дейтронной станции, функционирующей на базе малого ионного ускорителя – электростатического генератора Ван де Граафа, выявило необходимость увеличения ресурса вакуумной системы. В частности, основаниями для проведения настоящей работы послужили: а) относительно большой методически востребованный объем системы ($V \sim 40$ л., $P \sim 10^{-6}$ мм рт. ст.); б) множество стыков между приборами и устройствами, составляющими ионопровод (~ 70 вакуумных контактов); в) истечение эксплуатационного срока некоторых узлов вакуумной системы; г) необходимость компенсации ухудшения вакуума самим экспериментальным пучком; д) необходимость сокращения времени откачки при перезагрузке образцов во время эксперимента ($\sim 2,5$ ч).

С целью увеличения надежности системы были проведены поиск и устранение наиболее значимых течей, а также мероприятия по замене вакуумных затворов с истекшим сроком эксплуатации. Для увеличения откачивающих мощностей в ионопроводе успешно проведен цикл восстановительных работ с вакуумным насосом НОРД-250 ($P \sim 10^{-4} \div 10^{-6}$ мм рт. ст.). Для ускорения откачки ячейки образца был разработан и изготовлен стенд для запуска и испытания в рабочем режиме высоковакуумных насосов, а затем на стенде восстановлен и добавлен в систему вакуумирования насос НОРД-100 ($P \sim 10^{-4} \div 10^{-6}$ мм рт. ст.). Восстановлен и пущен в эксплуатацию СПЧ-10М – блок питания насосов ТМН-200. В итоге отрицательное влияние экспериментального пучка на уровень вакуума стало незначительным, а время подготовки вакуума после смены образцов сократилось с 2,5 часов до 40–50 минут.

Компьютерное моделирование динамического компрессора с плоско-выпуклым профилем лопаток

Е. А. Казаков

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Компрессор, в классическом понимании устройства для сжатия воздуха до плотности, превышающей атмосферную, широко распространен в настоящее время и будет абсолютно незаменим в том или ином виде до наступления эры принципиально новых двигателей.

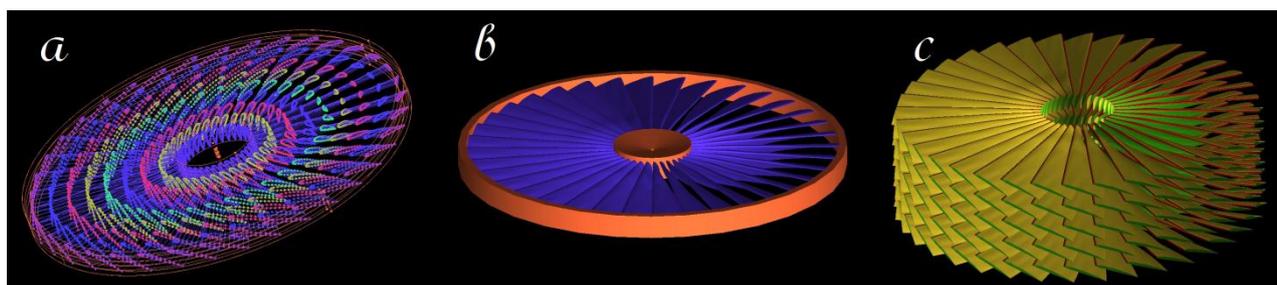


Рис. а – структурное представление рабочих лопаток; б – элементы корпуса и вала в составе рабочего колеса компрессора без технологических подробностей; в – многоступенчатый конструкт из пяти рабочих колес, не разделенных направляющими элементами

В данной работе моделируются элементы динамического (лопастного) осевого компрессора с плосковыпуклым профилем рабочих лопаток. В работе используется среда моделирования ANSYS и конечно-элементный подход. При моделировании каждой ступени компрессора присваивается собственный пространственный домен, вращающийся независимо. Предложенная схема может применяться для моделирования широкого ряда технологических конструкций: турбин и турбокомпрессоров, воздушных и гребных винтов, а также газотурбинных и турбовентиляторных двигателей.

Полихроматический полярирующий адаптер для конфокальной микроскопии

И. А. Киселев

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В настоящее время конфокальная микроскопия является одним из наиболее востребованных методов для изучения биологических объектов. Это обусловлено тем, что, хотя критерий Релея для конфокального микроскопа всего в 1,4 раза меньше, чем для обычного микроскопа, однако более высокая контрастность конфокального изображения позволяет разрешать близко расположенные объекты с соотношением интенсивностей до 1:200. К сожалению, это преимущество достигается за счет отсечения большей части выходящего из образца света и приводит к потере информации о поведении биологического объекта в целом. Для компенсации этого недостатка конфокальной микроскопии предлагается использовать, в дополнение к основному каналу получения изображения, полихроматическую схему Шрибака [1]. Данный подход позволяет наряду с фотолюминесценцией регистрировать изменение поляризации света при прохождении его через различные клеточные структуры, получая тем самым более информативное изображение клетки в условных цветах.

Для различных компоновок микроскопов предлагаются несколько схем адаптера: инверсная, аксиальная и латеральная. Первая более простая по исполнению и не требуют внешних источников света, две последние более информативны т. к. позволяют получать цветное изображение одновременно с работой основного канала конфокального микроскопа.

1. M. Shribak. Scientific Reports. V. 5, Article number: 17340 (2015).

Сравнение нейтронно-физических характеристик холодных замедлителей нейтронов в составе мишенной сборки компактного источника нейтронов DARIA

*Н. А. Коваленко¹, П. И. Коник¹, К. А. Павлов^{1,2}, А. О. Петрова^{1,2},
Г. Д. Довженко^{1,2}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Компактный источник нейтронов DARIA проектируется на основе ускорителя протонов с энергией до 13 МэВ и бериллиевой мишени. Выбор бериллия в качестве мишени позволяет получить по реакции ${}^9\text{Be}(p, n)$ 1 нейтрон на 1000 протонов, попавших в мишень [1]. Согласно проведенным расчетам, средняя энергия нейтронов в спектре, испускаемом бериллиевой мишенью, составляет ~ 2 МэВ, что согласуется с данными, представленными в работе [2]. Для детального изучения конденсированных сред необходимо предварительно замедлить нейтроны до энергий эВ-диапазоны (что соответствует длинам волн 2–20 ангстрем). Выбор материалов, формы и комбинации замедлителей выполняется под конкретную задачу. В данной работе изучались особенности использования и комбинирования различных «холодных» замедлителей (энергия нейтронов ниже 0,025 эВ). В качестве презамедлителя в работе использовалась вода при комнатной температуре.

Расчеты проводились с помощью кодов, использующих метод Монте-Карло. В работе приведены сравнительные физические характеристики для замедлителей из следующих материалов: полиэтилен, метан (твердый, жидкий), трифенилметан. Были получены спектры нейтронов на выходе из водяного, полиэтиленового, трифенилметанового и метанового замедлителей. Построены зависимости спектра нейтронов от температуры замедлителей. Рассмотрены различные формы исполнения замедлителей.

1. U. Rücker, T. Cronert, J. Voigt, J.P. Dabruck, P.-E. Doege, J. Ulrich, R. Nabbi, Y. Beßler, M. Butzek, M. Büscher, C. Lange, M. Klaus, T. Gutberlet, T. Brückel. The Jülich High Brilliance Neutron Source Project. (2013).
2. W.B. Howard, S.M. Grimes, J.C. Yanch. Measurement of the Thick Target Be(p, n) Neutron Energy Spectra (2009).

Алгоритм поиска размерного распределения с оценкой стабильности решения по данным малоуглового рассеяния

А. С. Козлова, В. В. Волков, А. Е. Крюкова, П. В. Конарев

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

Решение обратной задачи поиска размерного распределения наночастиц по данным малоуглового рассеяния как правило необходимо при исследовании структуры неупорядоченных или частично упорядоченных веществ. Это особенно актуально при разработке новых материалов. В силу того, что задача плохо обусловлена, ее решение, как правило, оказывается неустойчивым как к ошибкам в экспериментальных данных, так и сильно зависящим от стартового приближения. Поэтому задача оценки стабильности и надежности решения не менее важна, чем эффективность алгоритма его поиска. Основой методов оценок стабильности может быть анализ разброса решений, полученных при вариации параметров алгоритма поиска, стартовых приближений, возмущение данных случайным шумом и т. п. Эти методы, скорее, оценивают эффективность алгоритма поиска и интегральную степень устойчивости решения. Однако критерии оценок должны отражать не только качество описания исходных данных моделью, но и степень устойчивости параметров модели.

В данной работе предложен метод оценки устойчивости решений как степени чувствительности параметров находимой модели к искусственным вариациям исходных данных без внесения дополнительных искажений, таких, например, как добавление случайного шума. А также он позволяет провести отбор наиболее достоверного из найденных решений задачи. Суть алгоритма заключается в многократном изменении диапазонов входных данных с последующим сравнением получаемых решений. Такое варьирование позволяет изменять влияние на решение как априори неизвестных систематических ошибок, так и чувствительность параметров модели к различным диапазонам данных. Сравнение и отбор наиболее достоверного решения проводится с использованием критериев, основанных на корреляционных оценках. Анализ реализован на основе сингулярного разложения матрицы набора решений [1].

Для демонстрации использования предлагаемого в работе метода представлено его применение для расчета размерного распределения наночастиц в растворе кремнезема по данным рентгеновского рассеяния.

1. V.V. Volkov, Separation of Additive Mixture Spectra by a Self-Modeling Method, Applied Spectroscopy. V. 50. – No. 3. – P. 320 – 326 (1996).

Нейтронородная система реактора ПИК

П. И. Коник¹, Ю. М. Киреенко¹, К. А. Павлов^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}

*¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В этом году запланирован энергетический пуск реактора ПИК — мощнейшего в мире источника нейтронов постоянного действия. Полным ходом идет создание приборной базы реактора, которая позволит на его основе создать крупнейший нейтронный международный центр.

Среди прочих инструментов 12 будут использовать холодные нейтроны. Все эти приборы планируется установить на канале ГЭК-3, оборудованном источником холодных нейтронов. Для транспортировки нейтронов от канала к образцам создается развитая нейтронородная система. Ее ключевая особенность — адаптация параметров каждого пучка под нужды конкретной нейтронной установки. Оптимизация системы как целого таким образом заключается в согласовании требований отдельных нейтронородов в условиях заданного сечения канала и геометрических ограничений нейтронородного зала.

Нейтронородная система состоит из 6 начальных нейтронородов, некоторые из которых далее делятся на ветви, снабжающие нейтронами отдельные инструменты. Часть нейтронородов снабжена фокусирующими устройствами для повышения плотности нейтронного потока на образце.

В докладе будет представлена окончательная конфигурация нейтронородной системы, ее технические и нейтронно-физические параметры, а также будут обсуждаться конкретные трудности, с которыми мы столкнулись при ее проектировании. В настоящий момент нейтронородная система находится на стадии изготовления (подготовка рабоче-конструкторской документации и ее последующая реализация в «железе»).

Получение кремниево-германиевых наноструктур из двух линейных источников

Е. С. Кочугова, Н. О. Кривулин, Д. А. Павлов, А. А. Сушков

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

В настоящее время структуры на основе кремния и германия находятся в числе наиболее перспективных материалов современной твердотельной электроники [1]. Однако имеются трудности с получением равномерных по толщине кремний – германиевых слоев. Это связано с тем, что источник германия является точечным и получение слоев германия больших площадей, в этом случае, довольно проблематично.

Данная проблема решается, в нашем случае, с помощью дополнительных выемок вдоль всего графитового стержня под расплав германия, то есть создается несколько точечных источников испаряемого вещества с той целью, чтобы источник германия стал линейным.

Проследим за зависимостью толщины пленки германия от расстояния между источником и подложкой (рис.).

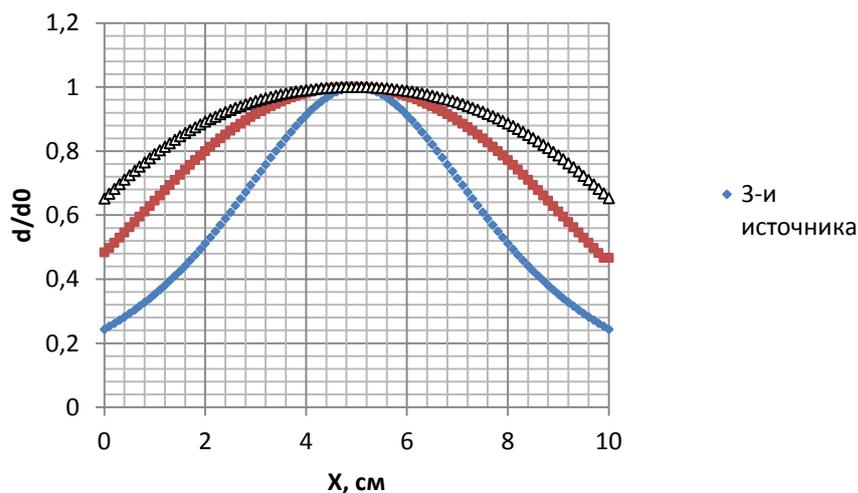


Рис. Профиль распределения толщины пленки в зависимости от расстояния между образцом и источником

По рисунку видно, что чем больше у нас точечных источников, расположенных вдоль графитового стержня длиной 10 см, тем равномернее по толщине у нас получается пленка германия.

Таким образом, наша разработка методики формирования кремний – германиевых наноструктур, намного упрощает процесс получения равномерно распределенных по толщине слоев и делает саму процедуру менее энергозатратной и доступной.

1. Макаренко Л. Ф., Ластовский С. Б., Мурин Л. И. и др. Характеристики междоузельных реакций в кремнии и кремний-германиевых сплавах, облученных альфа-частицами // 9-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом». – 2011 г. – 3 с.

Сравнение эффективности восстановления решений при анализе данных малоуглового рассеяния от раствора кремнезоля набором итеративных алгоритмов

А. Е. Крюкова^{1, 2}, П. В. Конарев^{1, 2}, В. В. Волков¹

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Метод малоуглового рассеяния (МУР) – один из наиболее информативных структурных методов для анализа полидисперсных систем. Для исследования такого рода объектов был выбран раствор кремнезоля [1, 2].

Ранее нами рассматривалась возможность восстановления функции распределения частиц по размерам для данных МУР от кремнезоля с помощью программы MIXTURE [3] (из пакета программ ATSAS [4]), в которой реализован метод переменной метрики в варианте Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно (BFGS) с простыми ограничениями на параметры [5]. После этого мы проверили, как изменятся границы устойчивого приближения при реализации в программе MIXTURE других итеративных алгоритмов, в частности, с использованием метода симулированного отжига (SA) и симплекс метода Нелдера-Мида (NM). Результаты моделирования приведены на рисунке.



Рис. Контурные графики устойчивости восстановления решения в зависимости от стартовых значений радиусов сферических частиц кремнезоля (R_1 , R_2)

Пересечение пунктирных линий соответствует точным (заданным) значениям параметров. Темные области – “неудача” (отличие от заданных параметров более чем на 5 %), светлые области – “успешное” нахождение решения (найденные параметры – в пределах 5 % от заданных). Использованные алгоритмы: (а) BFGS, (б) NM. На рис. а сплошными линиями показаны границы устойчивости для SA.

Как видно из графиков, наиболее эффективным является метод BFGS, так как позволяет находить решения в более широком диапазоне параметров.

1. V.E. Asadchikov et al., JETP Letters, 625, 94, № 7 (2011).
2. A.M. Tikhonov et al., JETP Letters, 880, 104, № 12 (2016).
3. P.V. Konarev et al., J. Appl. Cryst. 36, 1277 (2003).
4. M.V. Petoukhov et al., J. Appl. Cryst. 45, 342 (2012).
5. A.E. Kryukova et al., J. Cryst. Reports, 63, 4, 531 (2018).

Детекторы для изучения быстропротекающих процессов на пучке синхротронного излучения

Д. В. Кудашкин^{1,2}, Л. И. Шехтман¹

¹ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Синхротронное излучение (СИ) представляет собой уникальный инструмент для изучения быстропротекающих процессов. При наличии детектора, способного регистрировать СИ от одного сгустка электронов и не смешивать сигналы от различных сгустков, появляется возможность получать информацию об изменении состояния вещества в изучаемом объекте с очень высоким временным разрешением. Специально для экспериментов по исследованию быстропротекающих процессов на пучке СИ в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН был создан детектор DIMEX (Detector for Imaging of Explosions – детектор для изучения взрывов), способный регистрировать СИ от одного сгустка и не смешивать сигналы от различных сгустков и предоставляющий возможность получать информацию об изменении состояния вещества в изучаемом объекте с очень высоким временным разрешением.

В настоящей работе описаны систематические измерения основных параметров газового детектора DIMEX-G и кремниевого DIMEX-Si. Были оценены DQE, пространственное разрешение и временные параметры. Произведено сравнение параметров газовой и кремниевой версий DIMEX. Максимальный поток, который может быть измерен Si-детектором, в 40 раз выше, чем у газового детектора. Пространственное разрешение Si-детектора составляет 130 мкм, а газового детектора – 250 мкм. Оценка временного разрешения Si-детектора составляет 15 нс, в то время как для газового детектора это значение составляет около 50 нс. Было продемонстрировано, что частота кадров Si-детектора составляет 40 МГц. DQE газового детектора было измерено и значение на плато составило ~ 40 %. DQE Si-детектора не измерялось из-за очень высокого уровня шума электроники.

Моделирование электрической проводимости в системах «полимер – углеродные нанотрубки»

П. А. Лихоманова^{1, 2}, К. Ю. Хромов¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

В работе представлены результаты моделирования проводимости композитных систем полимер – углеродные нанотрубки (УНТ). Данные гетерогенные структуры представляют интерес, поскольку добавление в полимер некоторого количества нанотрубок (с концентрацией, при которой УНТ-соединения могут образовывать перколяционную сеть) позволяет получить из обычных полимеров - изоляторов, проводники при достижении перколяционного порога. Наличие электрической проводимости позволяет существенно расширить сферу применения полимеров. В частности, использовать их для производства нанокомпозитных материалов, востребованных в судостроении, аэрокосмической и других областях промышленности.

Представленная 3-D модель, позволяет рассчитать проводимость в два этапа: первый – формирование перколяционного кластера (здесь в качестве объектов для моделирования перколяции выступают капсулы с различными аспектными отношениями), второй этап – расчет проводимости перколяционного кластера с помощью закона Кирхгоффа [1]. Для каждой фиксированной концентрации УНТ расчеты были проведены с помощью метода Монте-Карло.

Полученные результаты моделирования позволяют описать эффект порогового возрастания проводимости и могут быть применены для оценки проводящих свойств систем типа полимер – УНТ.

1. S. Kirkpatrick, Reviews of modern physics, V. 45, N. 4, 1973.

Исследование структуры тонких слоев титана

В. А. Матвеев, Н. К. Плешанов, О. В. Геращенко

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В данной работе представлены результаты исследования кристаллической структуры тонких слоев Ti, получаемых с помощью магнетронного напыления. Для изучения кристаллической структуры был использован метод рентгеновской дифракции при скользящем падении пучка.

Результаты измерений показали наличие текстуры в слоях Ti, а также позволили оценить размер кристаллитов. Было установлено, что в области малых толщин (40 нм и менее) наблюдается зависимость величины размера кристаллитов от толщины Ti слоя.

Таким образом, ранее установленная нами обратная зависимость величины удельного электросопротивления ρ от толщины Ti слоя [1] может быть объяснена более высокой концентрацией границ зерен в слоях меньшей толщины. Это указывает на применимость, для описания проводимости тонких слоев Ti, моделей Fuchs-Sonderheimer [2, 3] и Mayadas-Shatzkes [4].

1. О. В. Геращенко, В. А. Матвеев и др., Физика твердого тела. 56, 1386 (2014).
2. K. Fuch, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 34, 100 (1938).
3. E.H. Sondheimer, Advances in Physics. 1. 1 (1952).
4. A.F. Mayadas, M. Shatzkes, and J.F. Janak, Applied Physics Letters. 14, 345 (1969).

Принципы построения установок нейтронного рассеяния на компактном источнике нейтронов

*К. А. Павлов^{1, 2}, П. И. Коник², Н. А. Коваленко², А. О. Петрова^{1, 2},
С. В. Григорьев^{1, 2}*

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В настоящее время в ведущих мировых центрах нейтронных исследований ведется разработка нового поколения источников нейтронов для нужд физики конденсированного состояния вещества. Компактные источники призваны заменить морально устаревающие реакторы малой и средней мощности и открыть возможности к созданию лаборатории нейтронного рассеяния в любой организации. Такой источник изначально уступает несколько порядков нейтронного потока крупному источнику ускорительного типа, однако, значительная часть этой разницы может быть отыграна за счет увеличения апертуры захвата и глубокой оптимизации установок, включающей в себя адаптацию параметров ускорителя, мишени и замедлителя под нужды конкретной установки, использующей источник.

В работе сформулирован общий подход к созданию установки нейтронного рассеяния на компактном источнике, на его основе описан облик требуемых ускорителя и мишени сборки. На примере трех методик – дифракции, спектроскопии и малоуглового рассеяния, – предложены экспериментальные схемы для реализации методов нейтронного рассеяния, рассчитан ряд оптических устройств, применение которых позволит наиболее эффективным образом использовать создаваемый нейтронный поток.

Для порошкового дифрактометра предложено использование двух сменных модераторов, имеющих тепловой и холодный максимум спектра. На установке устанавливаются два режима работы с оптимальной светосилой при заданном разрешении, отличающихся выбором рабочей полосы длин волн и обеспечивающих качественные измерения для исследований как кристаллической, так и магнитной структуры.

Для реализации метода нейтронной спектроскопии на компактном источнике выбрана времяпролетная техника в обратной геометрии. Она использована для создания т.н. сканера возбуждений в (q, E) -пространстве – эффективного инструмента анализа неупругого, квазиупругого и упругого рассеяния, обеспечивающего быстрое и всестороннее исследование динамики.

Из выбранных трех методов малоугловое рассеяние наиболее требовательно к светосиле источника, так как имеет самые жесткие требования к коллимации используемого пучка. Рассмотрена возможность реализации метода МУРН в фокусирующей геометрии.

Времяпролетный спектрометр CLEO на реакторе ПИК

А. О. Петрова^{1, 2}, П. И. Коник², Е. С. Клементьев³

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия

В связи со скорым выходом реактора ПИК на полную мощность необходимо создать приборную базу, максимально полезно использующую возможности источника. Одним из таких приборов станет времяпролетный спектрометр холодных нейтронов CLEO (Chopper Low Energy Observer). В круг его задач войдут исследования в области физики конденсированного состояния, материаловедения, физики полимеров, химии, биологии и других сфер науки. Спектрометр с каскадом дисковых прерывателей обеспечивает гибкость прибора в выборе энергии падающего на образец нейтронного пучка, а времяпролетная методика позволяет в одном эксперименте получать информацию о большой области обратного пространства и дает возможность анализировать упругое, квазиупругое и неупругое рассеяние. Диапазон используемых энергий нейтронов 0.5 мэВ – 20 мэВ (2–12 Å). Охватываемый детектором угол: +140 – -40 по горизонтали, -15 – +30 по вертикали.

В данном докладе будет представлен концептуальный проект времяпролетного спектрометра, где особенное внимание уделено оптимизации соотношения светосилы и разрешения, за что ответственен каскад дисковых прерывателей. Выбрана оптимальная конфигурация каскада, позволяющая сделать прибор более компактным и эффективным. Также будут представлены результаты оптимизации нейтронной оптики методом Монте-Карло моделирования.

Поиск нейтрино с массой (0,01–1,0) МэВ в бета-распадах ядер ^{144}Ce – ^{144}Pr

А. В. Дербин, И. С. Драчнев, И. С. Ломская, В. Н. Муратова, Н. В. Пилипенко,
Д. А. Семенов, Е. В. Унжаков

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Как известно, измеренная ширина распада Z -бозона ограничивает количество типов нейтрино тремя поколениями. Определенные значения параметров Δm_{ij}^2 и θ_{ij} и верхний предел на сумму масс легких нейтрино ограничивают наиболее тяжелое из трех массовых состояний нейтрино ν_i величиной 70 мэВ. Однако полностью исключить существование четвертого состояния нельзя. Возможные, более тяжелые, массовые состояния должны быть связаны со стерильными нейтрино – частицами, не участвующими в слабом взаимодействии. Такие частицы могут быть смешаны с тремя активными типами нейтрино и, соответственно, испытывать эффект осцилляций.

В настоящей работе рассматривается возможность проявления массивного нейтрино с массой от 1 кэВ до 3 МэВ в измеренных спектрах электронов, возникающих при бета-распаде ядер ^{144}Ce – ^{144}Pr . Для измерения спектра электронов источника ^{144}Ce – ^{144}Pr использовался спектрометр, состоящий из Si(Li)-детектора полного поглощения с диаметром чувствительной области 15.1 мм и толщиной 6.5 мм. Для измерения бета-спектра ^{144}Pr в широком диапазоне по энергии (0–3) МэВ, Si(Li)-детектор был оборудован двумя спектрометрическими каналами, регистрирующими события в энергетических интервалах (0.01–0.5) МэВ и (0.05–6.0) МэВ, соответственно, и состоящими из усилителей БУИ-3К и 14-разрядных АЦП (16000 каналов). Характеристики Si(Li)-детектора, такие как энергетическое разрешение, толщина входного окна и др. были определены при калибровочных измерениях с источником конверсионных и Ожэ-электронов ^{207}Bi .

В дополнение к Si(Li)-детектору в спектрометре был установлен тонкий пролетный кремниевый детектор размером 24 x 24 см² и толщиной 300 мкм. Пролетный детектор в режиме совпадений с Si(Li) – детектором позволял производить отбор событий, связанных с рентгеновской и гамма-активностью источника. Спектрометрический канал тонкого детектора содержал усилитель БУИ-3К и 12-ти разрядный АЦП (4000 каналов).

Измеренные спектры ^{144}Ce – ^{144}Pr были проанализированы с целью поиска вклада от тяжелого нейтрино с массой от 10 кэВ до 1 МэВ. Для нейтрино с массой в интервале (150–350) кэВ установлены новые верхние ограничения на параметр смешивания на уровне $|U_{eH}|^2 \leq (2 - 5) \cdot 10^{-3}$ для 90 % у. д.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 17-12-01009.

1. Дербин А. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 108.8 (2018), 531–536.

СЭМУРН с линейно растущими магнитными полями: первые результаты и дальнейшие улучшения

*В. И. Боднарчук¹, В. В. Садилов^{1,2}, С. А. Маношин¹, А. С. Дорошкевич¹,
А. В. Нагорный^{1,3}, А. И. Иоффе⁴, М. В. Авдеев¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия*

³ *Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина*

⁴ *Исследовательский центр Юлиха, Германия*

Работа посвящена изучению метода спинового эха для регистрации малоуглового рассеяния нейтронов с применением линейно растущего магнитного поля. Применение растущего поля позволяет задействовать нейтроны в широком диапазоне длин волн. Кроме того, ключевой параметр метода – спин-эхо длина Z обратно пропорциональна кубу длины волны $Z(\lambda) \sim \lambda^{-3}$ в отличие от традиционных СЭМУРН методов с постоянным или радиочастотным магнитными полями, где спин-эхо длина обратно пропорциональна квадрату длины волны. Это позволяет в перспективе достигать значительно больших значений Z при одних и тех же длинах волн нейтронов. Для создания линейного роста магнитного поля применяются треугольные импульсы магнитного поля. Такой подход является выгодным, в случае реализации на импульсных реакторах.

В настоящее время СЭМУРН установка с использованием пилообразных импульсов магнитного поля реализуется на 9-м канале реактора ИБР-2 в Дубне. На данный момент произведен первый запуск прототипа установки. В работе дается описание прототипа и самой методики СЭМУРН с линейно растущими магнитными полями. Также представлены первые результаты эксперимента по измерению спин-эхо фокусировки. Сравниваются полученные данные с модельным экспериментом, выполненным в программном пакете VITESS. Кроме того, обсуждаются дальнейшие улучшения прототипа.

1. Ioffe A., Nucl. Instr. and Meth. A 586, pp. 31–35 (2008).
2. Bodnarchuk V., Sadilov V., Manoshin S., Erhan R.V., Ioffe A. // J. Phys.: Conf. Ser., V. 862, 012003 (2017).
3. Keller T., Gaehler R., Kuntze H., Golub R. // Neutron News, 6(3), pp. 16–17 (1995).
4. Rekveldt M.Th. // NIM A114, pp. 366–370 (1996).
5. Ioffe A. // NIM A586, pp. 31–35 (2008).
6. Ioffe A. // NIM A634, pp. 55–58 (2011).

Времяпролетный TOF-спектрометр

*М. В. Дьячков, В. А. Ульянов, В. А. Соловей,
М. Р. Колхидашвили, Т. В. Савельева*

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Времяпролетный (Time Of Flight или TOF) спектрометр позволяет измерять поток и энергетический спектр нейтронного пучка. Измерение потока и энергетического спектра нейтронов осуществляется по времяпролетной методике с помощью системы прерывателя нейтронного пучка (Disk chopper) и детектора (He^3 detector) с изменяемой пролетной базой от двух до шести метров. Прерыватель оснащен механической автоматизированной системой перемещений, функционирование которой обеспечивают аппаратные и программные средства.

Аппаратные средства включают в себя электронику для измерения времени пролета нейтронов и систему управления шаговыми двигателями.

Электроника для измерения времени пролета нейтронов включает следующие разработанные в ПИЯФ устройства:

- предусилитель с высоковольтным фильтром;
- двухканальный усилитель RV165.13;
- многоканальный время-цифровой преобразователь со встроенным многоканальным анализатором и интерфейсом USB – RV161.15;
- высоковольтный источник питания детектора RV422.38K1-3U;
- источник питания электроники RV422.34;
- устройство генерации стартовых сигналов.

Система управления шаговыми двигателями включает в себя:

- управляемые контролеры-драйверы шаговых двигателей Trinamic – RV145.06;
- источник питания Mean Well – RV422.39.

Программное обеспечение, уставленное на управляющем компьютере, осуществляет управление движением оборудования к заданной позиции, отображение текущей интегральной интенсивности нейтронов на детекторе в графическом виде, установку параметров работы устройств.

Список участников

ФИО	Организация	E-mail	Стр.
Arifullin Marsel Ravshanovich	Orenburg University	arifullinm@mail.ru	185
Artykulnyi Oleksandr Petrovych	ОИЯИ	artykulnyi@jinr.ru	17
Baranova Iuliia	Institute of physics, ELI beamlines, CAS	jul.bar.g@yandex.ru	169
Dmitriev Artem	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	DmitrievAV@mail.ioffe.ru	
Fabreges Xavier	LLB, CEА	xavier.fabreges@gmail.com	4
Goukassov Arsen	LLB, CEА	arsen.goukassov@gmail.com	5
Hrubovcak Pavol	ОИЯИ	hrubovcak.pavol@gmail.com	13
Ildio Rodrigues Jaderson	СПбГУ	jadersonrildio@gmail.com	70
Ismayilova Narmin Arif	Институт физики НАН Азербайджана	ismayilova_narmin_84@mail.ru	194
Kononikhina Victoria	Helmholz-Zentrum Geesthacht	victoriakononikhina@gmail.com	
Kulda Jiri	ILL	kulda@ill.fr	
Mikayilova Amina Jumshud	Institute of Radiation Problems of ANAS	mikayilova.a.c@gmail.com	
Novikov Dmitri	DESY	dmitri.novikov@desy.de	
Pankov Sergey Evgenievich	ОИЯИ	hy6-5@yandex.ru	
Salmanov Famin Tahir	ИК РАН	famin-salmanov@rambler.ru	
Shemchuk Olga Sergeevna	СПбГУ	olja.shemchuk17@gmail.com	73
Shvaleva Mariia Alexandrovna	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	shvaleva_ma@pnpi.nrcki.ru	
Yorov Khursand	МГУ	khursandy@gmail.com	107
Абасзаде Рашад Габил оглы	НАН Азербайджана	Abaszada@gmail.com	182
Авраменко Марина Владиславовна	ЮФУ	avramenko.marina@gmail.com	74
Агеев Сергей Вадимович	СПбГУ	ageev.sergey06@gmail.com	75
Азарова Любовь Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	loveazarova@gmail.com	14
Аккуратов Валентин Иванович	НИЦ «Курчатовский институт»	def_93@list.ru	212
Акрамов Данил Фларитович	УрФУ ИЕНиМ	dmaster96@mail.ru	76
Алигулиева Хаяла Вагиф	Сумгаитский государственный университет	xayala-firuza@mail.ru	183
Алиев Орхан Ахмед оглы	НАН Азербайджана	Abaszade@rambler.ru	

Алтынбаев Евгений Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	evgeniy.alt@mail.ru	15
Алтынбаев Линар Алмазович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	altynbaev.linar@yandex.ru	184
Алыев Юсиф Имрайыл оглы	Институт физики НАН Азербайджана	yusifafshar@gmail.com	43
Аникеева Василиса Евгеньевна	ИСАН	anikeeva.ve@phystech.edu	77
Антипин Александр Максимович	ИК РАН	antipin@physics.msu.ru	78
Антонова Юлия Владимировна	ФГБОУ ВО ЧелГУ	lupitskaya@gmail.com	
Аристов Дмитрий Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	aristov@thd.pnpi.spb.ru	
Асваров Абил Шамсудинович	ИК РАН	abil-as@list.ru	79
Астафьев Сергей Борисович	ИК РАН	bard@crys.ras.ru	44
Аткнин Иван Иванович	НИЦ «Курчатовский институт»	ivan@atknin.ru	45
Бабарикин Денис Сергеевич	ЮФУ	octodjesus@gmail.com	46
Бабихина Мария Николаевна	ТПУ	m.babihina@mail.ru	186
Бакиева Ольга Ринатовна	УдмФИЦ УРО РАН	ftiran@mail.ru	47
Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	
Балаш Илья Ильич	ИЯФ СО РАН	drtwdr77@gmail.com	48
Белогорлов Антон Анатольевич	НИЯУ МИФИ	aabelogorlov@mephi.ru	
Бельтюков Артемий Николаевич	УдмФИЦ УРО РАН	beltukov.a.n@gmail.com	80
Бойцова Ольга Владимировна	ИОНХ РАН	boytsova@gmail.com	81
Болдырев Кирилл Николаевич	Институт спектроскопии РАН	kn.boldyrev@gmail.com	82
Бондарев Алексей Владимирович	ВГТУ	bondarev_a_v@mail.ru	187
Бортникова Светлана Алексеевна	НИЯУ МИФИ	svetlana.sweta7@yandex.ru	83
Бочаров Дмитрий	ИФТТ Латвийского университета	bocharov@latnet.lv	188
Бугров Александр Николаевич	ИВС РАН	bugrov.an@mail.ru	84
Булкин Алексей Петрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	boulkin_ap@pnpi.nrcki.ru	

Буташин Андрей Викторович	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	boutic@ns.crys.ras.ru	85
Быков Алексей Анатольевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	redi87@bk.ru	18
Быков Эдуард Олегович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	mcgector@yandex.ru	
Вайгель Любовь Александровна	ИЯФ СО РАН	lyubovwaigel@gmail.com	49
Валеев Ришат Галеевич	УдмФИЦ УрО РАН	rishatvaleev@mail.ru	86 88
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	50
Васильев Андрей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	aivasilev92@mail.ru	19
Васин Денис Сергеевич	ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	dsvasin@physics.by	89
Васин Михаил Геннадьевич	ИФВД РАН	dr_vasin@mail.ru	6
Вдовина Евгения Константиновна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	vdovina96@list.ru	
Волков Владимир Владимирович	ИК РАН	volkicras@mail.ru	
Волчков Иван Сергеевич	ИК РАН	volch2862@gmail.com	90
Волыхов Андрей Александрович	ИОНХ РАН	andyvolykhov@yandex.ru	189
Гаврилов Сергей Викторович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gavriov_sv@pnpi.nrcki.ru	
Гартвик Андрей Витальевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gartvig_av@pnpi.nrcki.ru	213
Гасанов Рамин Айяр	Институт систем управления НАНА	ramingasanov@mail.ru	
Герашенко Олег Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gerashchenko_ov@pnpi.nrcki.ru	
Гермов Александр Юрьевич	ИФМ УрО РАН	germov@imp.uran.ru	91
Глебова Ирина Борисовна	ИХС РАН	iraglebova@mail.ru	92
Глушкова Татьяна Ивановна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	glushkova_ti@pnpi.nrcki.ru	214
Головин Игорь Станиславович	НИТУ «МИСиС»	i.golovin@misis.ru	
Голушко Иван Юрьевич	ЮФУ	vaniagolushko@yandex.ru	
Гончарова Анна Сергеевна	МГУ	goncharoAS@gmail.com	93
Горьковская Екатерина Дмитриевна	ЮФУ	ekaterina_gorkovaya@mail.ru	95

Грибанова Светлана Алексеевна	ИНХ СО РАН	abazurchik@mail.ru	96
Григорьев Сергей Валентинович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru	
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	n.a.grigorieva@spbu.ru	
Губанова Надежда Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gubanova_nn@pnpi.nrcki.ru	7
Гусейнов Гусейн Джалил оглы	АП НАН Азербайджана	huseyn-1978@mail.ru	97
Девятериков Денис Игоревич	ИФМ УрО РАН	devidor@yandex.ru	51
Дегтяренко Алена Юрьевна	НИЦ КИ	ALevakhova@gmail.com	215
Дегтяренко Павел Николаевич	ОИВТ РАН	degtyarenkopn@gmail.com	99
Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	190
Джабаров Сакин Гамид оглы	Институт физики НАН Азербайджана	sakin@jinr.ru	71
Джантемиров Ауес Хасамбиевич	ЮФУ	Dzhantemirov.27@yandex.ru	191
Дубицкий Илья Семенович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	32167i@mail.ru	100 101
Дудко Анна Владимировна	Евразийский национальный университет	acquafelice91@mail.ru	102
Дурыманов Вениамин Александрович	ЮФУ	shakior_5454@mail.ru	103
Дьячков Максим Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	maximonian@yandex.ru	232
Егизбек Камила Бахтжанкызы	ИЯФ	kemelin@mail.ru	192
Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ	eliseev@inorg.chem.msu.ru	104
Елисеев Артем Анатольевич	МГУ	artem.a.eliseev@gmail.com	
Елмекави Ахмед Хассан	СПбГУ	ahmedalmekawy@ymail.com	105
Ерагер Ксения Романовна	ЧелГУ	eragerk@rambler.ru	106
Ермекова Асель Ермековна	ИЯФ	allessyer@gmail.com	193
Ерыженков Александр Владимирович	СПбГУ	st037623@student.spbu.ru	
Жилова Ольга Владимировна	ВГТУ	zhilova105@mail.ru	108

Жогин Иван Львович	ИЦ «Буревестник»	zhogin_il@bourestnik.spb.ru	216
Завьялова Анастасия Юрьевна	СПБГЭТУ (ЛЭТИ)	zavialova.a.y@gmail.com	109
Зайнуллин Олег Борисович	ИК РАН	evil_hamster@mail.ru	110
Зобкало Игорь Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	Zobkalo_IA@pnpi.nrcki.ru	
Зубарь Татьяна Игоревна	ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	fix.tatyana@gmail.com	111
Иванов Александр	ИЛЛ	aivanov@ill.fr	
Иванова Александра Геннадьевна	ИХС РАН	agp-13@inbox.ru	8
Иваньков Александр Игоревич	ОИЯИ	ivankov@jinr.ru	
Ивахненко Наталья Николаевна	Донецкий ФТИ	yulduz19.77@mail.ru	112
Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН	ivitcheva@mail.ru	113 114
Ипатов Александр Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ipatov_av@pnpi.nrcki.ru	217
Ипатов Дмитрий Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	dmitrii.ipatov@rambler.ru	
Исмаилова Хадижа Икрам	Сумгаитский государственный университет	khayala.biznes81@gmail.com	195
Исупова Евгения Александровна	ННГУ	evgeniya.isupova@yandex.ru	115
Казаков Евгений Алексеевич	ЮФУ	sechevik@gmail.com	218
Казанцев Сергей Романович	ИЯФ СО РАН	s.kazantsev@g.nsu.ru	52
Казымов Фамил Маиль оглы	НАН Азербайджана	fail_kazimov@yahoo.com	
Каменских Ирина Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	iak@opts.phys.msu.ru	
Камышова Елизавета Геннадиевна	ЮФУ	kamyshova.liza@gmail.com	116
Карпец Максим Леонидович	ОИЯИ	karpetsmax@gmail.com	20
Карпов Иван Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт»	idkarpov@ya.ru	21
Картапова Татьяна Сергеевна	УдмФИЦ УрО РАН	radostinka301@yandex.ru	117
Касимова Валентина Маратовна	НИТУ «МИСиС»	kasimovavalya@mail.ru	118

Касумова Рена Гофиг	ИИТ НАН Азербайджана	renakasumova@gmail.com	
Каширин Максим Александрович	ВГУ	mnitro@yandex.ru	119
Кенесарин Мурат Русланулы	ОИЯИ	muratkenessarini@gmail.com	22
Киреенко Юрий Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	osnerde@gmail.com	
Киряков Арсений Николаевич	УрФУ	Seni-i@yandex.ru	
Киселев Игорь Анатольевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	igkiselev@gmail.com	219
Кичанов Сергей Евгеньевич	ОИЯИ	ekich@nf.jinr.ru	9
Кобелев Андрей Дмитриевич	МГУ	cubandroid0@gmail.com	120
Ковалев Анатолий Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	kovalev_av@pnpi.nrcki.ru	23
Коваленко Никита Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	kovalenko_na@pnpi.nrcki.ru	220
Коваль Ольга Юрьевна	СПБАУ	o.yu.koval@gmail.com	
Козлова Алена Сергеевна	ИК РАН	Alreszensia.future@yandex.ru	221
Козлова Наталья Николаевна	ИК РАН	79647099102@yandex.ru	121
Козловский Артем	ЕНУ, ИЯФ, Астана	artem88sddt@mail.ru	123
Коморников Владимир Андреевич	ИК РАН	v.a.kom@mail.ru	124
Коник Петр Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	104pet104@gmail.com	222
Коновалов Глеб Георгиевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	glebkonovalov@list.ru	
Копица Геннадий Петрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	kopitsa@lns.pnpi.spb.ru	
Кордонская Юлия Владимировна	НИЦ «Курчатовский институт»	yukord@mail.ru	170
Коршунов Артем	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	artem.korshunov91@gmail.com	24
Кочугова Елена Сергеевна	ННГУ	a.kochugova@mail.ru	223
Кременко Станислав Игоревич	ИГиЛ СО РАН	kremenko_stanislav@mail.ru	53
Крюкова Алена Евгеньевна	ИК РАН	Alenka3112007@yandex.ru	224
Кудашкин Дмитрий Вячеславович	ИЯФ СО РАН	kudashkindmitrii@yandex.ru	225

Кузьмин Алексей	CFI LU	a.kuzmin@cfi.lu.lv	54
Куликов Антон Геннадьевич	НИЦ КИ	ontonic@gmail.com	125
Кулишов Артем Андреевич	ИК РАН	adakyla1255@gmail.com	126
Курбаков Александр Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru	
Курочкин Александр Викторович	Томский политехнический университет	avkurochkin93@mail.ru	127
Кучма Елена Александровна	МИИ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	elenaku4ma@yandex.ru	171
Кучугура Мария Дмитриевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	mariya_kuchugura@mail.ru	
Кушнир Сергей Евгеньевич	МГУ	kushnirsergey@gmail.com	128
Левицкая Виктория Павловна	ЮФУ	lvenokvika@yandex.ru	129
Леонтьев Игорь Николаевич	ЮФУ	i.leontiev@rambler.ru	
Литвиненко Глеб Витальевич	НИТУ «МИСиС»	gleb.litvinenko@gmail.com	
Лихоманова Полина Андреевна	НИЦ «Курчатовский институт»	likhomanovapa@gmail.com	226
Лобанова Евгения Юрьевна	Университет ИТМО	repkakkk2@yandex.ru	130
Логинова Светлана Владимировна	ПетрГУ	svlog@mail.ru	131
Магеррамова Севиль Мамедгусейн	Институт биофизики НАНА	sevil.maharramova@mail.ru	
Майорова Анна Владимировна	СПбПУ	kovtun_anna@bk.ru	10
Матасов Макс Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matasov_md@pnpi.nrcki.ru	
Матвеев Василий Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matveev@ins.pnpi.spb.ru	227
Матвеева Анна Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matveeva_an@pnpi.nrcki.ru	25
Матяш Яна Юрьевна	ЮФУ	myauioanna@yandex.ru	55
Мельников Игорь Александрович	ESRF	igor.melnikov@esrf.fr	
Меньчиков Ян Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	menchikov96@list.ru	
Меньшикова Светлана Геннадьевна	УдмФИЦ УрО РАН	svetlmensh@mail.ru	

Миронов Евгений Павлович	НИЦ «Курчатовский институт»	Qventus@mail.ru	172
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	misston@rambler.ru	
Михейкин Алексей Сергеевич	ЮФУ	aleksey.mikheykin@gmail.com	132
Молчанова Анастасия Дмитриевна	Институт спектроскопии РАН	nastyamolchanova@list.ru	133
Мудровская Наталья Владимировна	ИГиП ДВО РАН	fedorova@ascnet.ru	134
Мурашев Михаил Михайлович	НИЦ КИ	mihail.mmm@inbox.ru	26
Муслимов Арсен Эмирбегович	ИК РАН	betsa197809@mail.ru	135
Мустахиева Дина Адилханкызы	Евразийский национальный университет	mustakhievadi@mail.ru	196
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	aanaberezhnov@gmail.com	
Набиев Асиф Араслы оглы	ОИЯИ	asifnebi@gmail.com	27
Николаев Илья Игоревич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	iljanikolaevstorm@mail.ru	56
Никулин Алексей Юрьевич	ЮФУ	chemistnik@ya.ru	136
Ниязов Рамиль Асхатович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ramilniyazov@gmail.com	197
Пилипенко/Ниязова Нелли Витальевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	pilipenko_nv@pnpi.nrcki.ru	230
Новикова Наталья Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт»	nn-novikova07@yandex.ru	
Носов Павел Алексеевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	p.nosov1995@gmail.com	198
Нухов Азим Кадимович	МФТИ	nukhov1984@mail.ru	199
Обозова Екатерина Дмитриевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	oed1990@gmail.com	137
Овсяников Александр Константинович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ovsyanikov_a_k@mail.ru	28
Окороков Алексей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	okorokov_ai@pnpi.nrcki.ru	
Осинская Юлия Владимировна	Самарский университет	ojv76@mail.ru	138
Павленко Анатолий Владимирович	Южный научный центр РАН	tolik_260686@mail.ru	139

Павлов Константин Андреевич	СПбГУ, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	fairy.neutrons@yandex.ru	228
Павлова Алина Андреевна	ВГТУ	alina.pavlova.htsc@gmail.com	58
Палачева Валерия Валерьевна	НИТУ «МИСиС»	lera.palacheva@mail.ru	29
Пашин Дмитрий Сергеевич	ННГУ	pashindmi@gmail.com	
Петренко Арсен Александрович	НИЦ КИ	diacon0301@gmail.com	59
Петров Владислав Павлович	УрФУ	vladislav.petrov@urfu.ru	
Петрова Анита Олеговна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ani_petrova@mail.ru	229
Подольский Никита Евгеньевич	СПбГУ	npodolsky48@gmail.com	72
Подурец Константин Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт»	podurets@yandex.ru	
Покоев Александр Владимирович	Самарский университет	a.v.pokoev46@mail.ru	140
Полушина Анастасия Дмитриевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	Nasa96@yandex.ru	141
Попов Александр Николаевич	ESRF	apopov@esrf.fr	
Почкаева Евгения Игоревна	НМИЦ им. В. А. Алмазова	pochapocha20@mail.ru	173
Проценко Андрей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт»	8xenderx8@gmail.com	60
Пустовойт Полина Марковна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	polinapus@mail.ru	174
Пшеничный Кирилл Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	pshcyrill@lns.pnpi.spb.ru	30, 31
Разумная Анна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	
Редьков Алексей Викторович	ИПМаш РАН	red-alex@mail.ru	
Рогалев Андрей Леонидович	ESRF	rogalev.andrei@gmail.com	
Росляков Илья Владимирович	МГУ	ilya.roslyakov@gmail.com	61 142
Рошаль Дарья Сергеевна	ЮФУ	rochal.d@yandex.ru	175
Рубаник Дарья Сергеевна	ЮФУ	missdare.dr@gmail.com	200
Рулев Максим Игоревич	ESRF	maksim.rulev@esrf.fr	
Рунов Владимир Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	runov_vv@pnpi.nrcki.ru	

Рунова Маина Константиновна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	runova_mk@pnpi.nrcki.ru	
Рыжов Вячеслав Анатольевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	
Рылов Сергей Александрович	НИЦ «Курчатовский институт»	rylovsergey25@gmail.com	32
Рябинкин Евгений Александрович	НИЦ «Курчатовский институт»	rea@grid.kiae.ru	
Рябцев Александр Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	Aleksandr0397@bk.ru	33
Рязанов Валерий Владимирович	ИФТТ РАН	valery.ryazanov@gmail.com	
Савицкая Наталья Евгеньевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	savitska@inbox.ru	11
Садилов Валентин Викторович	ОИЯИ	sadilov@jinr.ru	231
Садыков Алексей Игоревич	МГУ	alex9613@yandex.ru	143 144
Саламатин Денис Александрович	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	145
Сапунов Георгий Андреевич	СПБАУ	sapunovgeorgiy@gmail.com	
Селезнева Елена Вячеславовна	ИК РАН	msdmitricheva@yandex.ru	146
Сергеев Александр Викторович	ВГТУ	sergeev-av@bk.ru	168
Сизов Александр Вячеславович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	sizzoffav1@mail.ru	
Сийдра Екатерина Николаевна	СПбГУ	siidra.e.n@gmail.com	147
Симановский Дмитрий Владимирович	ННГУ	dmitrysimanovsky@yandex.ru	148
Симачкова Галина Андреевна	ЮФУ	galina993102130@gmail.com	149
Симионенко Лев Эдуардович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	lev.simionenko@gmail.com	
Сканченко Дарья Олеговна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	skanchenko_do@pnpi.nrcki.ru	34
Скобёлкина Анастасия Владимировна	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	snastya.19996@mail.ru	177
Ской Вадим Вадимович	ОИЯИ	vskoj@yandex.ru	176
Скорынина Алина Александровна	ЮФУ	alinaskorynina@rambler.ru	150
Смирнова Екатерина Сергеевна	ИК РАН	esmi@ns.crys.ras.ru	151
Смыслов Руслан Юрьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	urs1968@gmail.com	

Созонтов Евгений Аркадьевич	НИЦ «Курчатовский институт»	esozontov@yahoo.com	62
Солобай Анастасия Андреевна	ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	catacore@mail.ru	152
Солонинкина Мария Васильевна	ПетрГУ	mas31393@yandex.ru	153
Сорокин Александр Олегович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	aosorokin@gmail.com	
Сошинская Екатерина Юрьевна	ИК РАН	katuffus@rambler.ru	178
Степанова Ангелина Геннадьевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	asg96@mail.ru	
Столяров Андрей Андреевич	ИЯИ РАН	AStolyarov@inr.ru	36
Строков Иван Игоревич	ИЯФ СО РАН	strokovhii@gmail.com	63
Стульников Андрей Александрович	СПбПУ	Andreystulnikov@gmail.com	154
Сундеев Роман Вячеславович	РТУ МИРЭА	sundeev55@yandex.ru	
Суслов Антон Владимирович	РГПУ	a.v_suslov@mail.ru	
Суслопарова Анна Евгеньевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	susloparovanna@mail.ru	37
Сухарина Галина Борисовна	ЮФУ	gbsukharina@sfedu.ru	167
Сушков Артем Александрович	ННГУ	sushkovartem@gmail.com	201
Суюсова Марина Вадимовна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	suyasova_mv@pnpi.nrcki.ru	38
Сыромятников Арсений Владиславович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru	
Талыфлы Айсель Физули	Сумгаитский государственный университет	talibli_aysel@mail.ru	202
Таргонский Антон Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт»	tantva@ya.ru	64
Тарнавич Владислав Валерьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	tarnavich_vv@pnpi.nrcki.ru	
Терехова Юлия Сергеевна	НИТУ «МИСиС»	terehova_julia@rambler.ru	155
Терещенко Алексей Анатольевич	УрФУ	tenxor@mail.ru	203

Терещенко Елена Юрьевна	НИЦ «Курчатовский институт», ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	helen_t@crys.ras.ru	
Тимаков Иван Сергеевич	ИК РАН	selos93@mail.ru	156
Тимофеев Виктор Евгеньевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	timofeevictor@gmail.com	204
Тишкевич Дарья Ивановна	ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	dashachushkova@gmail.com	157
Топорищев Константин Георгиевич	ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ»	erunda-da@yandex.ru	205
Топорова Наталья Максимовна	ИЕНиМ УрФУ	toporova.natalia1402@mail.ru	158
Тухватулина Тансу Айратовна	СПбПУ	ttansu96@gmail.com	159
Тюлюсов Антон Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ	tyulyusov@yandex.ru	39
Ульянов Владимир Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ulyanov_va@pnpi.nrcki.ru	
Усманов Олег Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	usmanow93@gmail.com	180
Утесов Олег Игоревич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	utiosov@gmail.com	206
Фиалковский Игнат Витальевич	Ariel University	ifialk@gmail.com	
Фильнов Сергей Олегович	СПбГУ	sfilnov@gmail.com	207
Фокин Никита Сергеевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	nik-fokin-1996@mail.ru	
Хрыкина Ольга Николаевна	ИК РАН	kvarkpower@gmail.com	160
Цалан Ярослав Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	yarosla-cala@yandex.ru	
Цвигун Наталья Викторовна	ИК РАН	n_tsvigun@mail.ru	161
Цыпильников Андрей Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	andrei.tsypilnikov92@gmail.com	208
Чалин Дмитрий Вадимович	ЮФУ	chalin.d.v@mail.ru	209
Чен Тэсик	РТУ МИРЭА	chen.tt@mail.ru	65
Черепанов Дмитрий Евгеньевич	ИЯФ СО РАН	dcherepanov9884@gmail.com	162
Чернецкая Мария Дмитриевна	ИЯФ СО РАН	chernetskaya36@gmail.com	
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	

Четвериков Юрий Олегович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	yuriychetv@gmail.com	
Чубова Надежда Михайловна	НИЦ «Курчатовский институт»	chubova_nm@pnpi.nrcki.ru	
Чукавин Андрей Игоревич	УдмФИЦ УрО РАН	andrey_chukawin@mail.ru	163
Шагинян Анаида Луспароновна	ЮФУ	anaidashaginyan@yandex.ru	66
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	shapiro@mail.ru	40
Шарипов Мирзо Зокирович	БухИТИ	m.z.sharipov@rambler.ru	
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	mischar@mail.ru	164
Шаталов Александр Сергеевич	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	Shura_shatalov@inbox.ru	210
Шевченко Мария Ивановна	УрФУ	maria.shevchenko19@mail.ru	179
Шемет Дарья Борисовна	ЮФУ	Shemetdabo@mail.ru	211
Шестаков Александр Евгеньевич	ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ»	a.e.shestakov@list.ru	165
Шилова Ольга Алексеевна	ИХС РАН	olgashilova@bk.ru	12
Шмайснер Йоханн	НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ	vny007@mail.ru	41
Шмелев Сергей Евгеньевич	ИК РАН	migel93@mail.ru	
Штarkман Лев Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	shtarkmanlev@mail.ru	
Элиович Ян Александрович	ИК РАН	yan.eliovich@gmail.com	68
Эм Вячеслав Терентьевич	НИЦ «Курчатовский институт»	vtem9@mail.ru	
Юзвюк Мария	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	quesada21@gmail.com	69
Юрьев Глеб Олегович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	glebbi407@mail.ru	181
Янусова Людмила Германовна	ИК РАН	yanusova@crys.ras.ru	
Япрынцеv Алексей Дмитриевич	ИОНХ РАН	yapryncev@mail.ru	166
Яшина Екатерина Геннадьевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	yashina_91@inbox.ru	42

Отпечатано с готового оригинал-макета
в типографии НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
188300, Гатчина Ленинградской обл., мкр. Орлова роща, д. 1
Зак. 71, тир. 220, уч.-изд. л. 12,7; 28.02.2019 г.
Формат 60 × 84 1/16, печать офсетная