

Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»
Федеральное государственное бюджетное учреждение
«ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Б. П. КОНСТАНТИНОВА»

**Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

ФКС-2016
14–19 марта 2016 г., Санкт-Петербург



**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2016

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
Федеральное государственное бюджетное учреждение
«ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Б. П. КОНСТАНТИНОВА»

**Л Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

ФКС-2016
14–19 марта 2016 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2016

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников L Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2016), 14–19 марта 2016 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the L PNPI School on condensed state physics (CSP-2016). (14–19 of March, 2016, Saint-Petersburg).

Проведению Школы оказали поддержку:

**Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
Российский фонд фундаментальных исследований**

Сборник подготовили А. И. Огороков, Н. Н. Губанова, Н. М. Чубова

Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.

© ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт», 2016

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции	4
Стендовые доклады	
Секция «Нейтронное рассеяние»	18
Секция «Рассеяние синхротронного излучения»	55
Секция «Материалы и минералы»	75
Секция «Биофизика и наука о жизни»	152
Секция «Теория физики твердого тела»	164
Секция «Методика моделирования и приборы»	209
Список участников	250

Возможности просвечивающей электронной микроскопии в исследовании структуры материалов

А. М. Абакумов

*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

За последнее десятилетие просвечивающая электронная микроскопия продемонстрировала впечатляющий прогресс в анализе структуры, состава и электронного строения материалов с беспрецедентным пространственным и энергетическим разрешением. Несмотря на динамические эффекты, современные методы электронной томографии обратного пространства позволяют проводить решение и уточнение кристаллической структуры материалов по дифракционным данным, полученным с субмикронного образца. Изображения, полученные при помощи сканирующей просвечивающей электронной микроскопии с корректором сферической аберрации могут быть непосредственно интерпретированы как проекции рассеивающей плотности кристалла с субангстремным разрешением. Использование корректора аберраций позволяет локализовать даже такие «легкие» атомы, как H и Li, что может быть использовано для визуализации модуляций атомных смещений и/или состава. Дополнительная структурная и химическая информация может быть получена при помощи спектроскопии энергетических потерь электронов, которая позволяет картировать распределение степени окисления и координационного числа интересующего элемента и энергодисперсионного рентгеновского анализа с атомным разрешением, позволяющего определять расположение в кристаллической структуре элементов с близкими рассеивающими факторами. Применение этих методов к анализу материалов на атомном уровне будет проиллюстрировано в докладе на примерах аниондефицитных перовскитов со структурами кристаллографического сдвига, несоразмерно модулированных структур, катодов для Li-ионных аккумуляторов и электрокатализаторов реакций восстановления/выделения кислорода в щелочных топливных элементах.

Recent progress in all-dielectric optical antennas

*P. A. Belov¹, A. E. Krasnok¹, D. S. Filonov¹, A. P. Slobzhanyuk¹,
C. R. Simovski², A. E. Miroshnichenko³, Yu. S. Kivshar^{1, 3}*

¹ *ITMO University, Dept. of Nanophotonics and Metamaterials, Saint-Petersburg, Russia*

² *Aalto University, School of Electric and Electronic Engineering, Aalto, Finland*

³ *Nonlinear Physics Centre, Research School of Physics and Engineering,
Australian National University, Canberra, Australia*

We suggest and verify experimentally a novel type of optical nanoantennas made of high-permittivity low-loss dielectric spheres. In addition to the electric resonances, they exhibit very strong magnetic resonances at the nanoscale. By placing a point-like dipole source near a single dielectric particle driven at the magnetic resonance results the radiation pattern similar to that of a Huygens source with the enhanced forward and vanishing backward emission. This feature can be employed in the Yagi-Uda geometry for highly efficient optical nanoantennas.

We introduce a novel concept of superdirective nanoantennas based on the generation of higherorder optically-induced magnetic multipoles. Such an all-dielectric nanoantenna can be realized as an optically small spherical dielectric nanoparticle with a notch excited by a point source located in the notch. We also confirm the predicted superdirectivity effect experimentally through scaling to the microwave frequency range.

Coherent X-ray imaging and dynamics of mesoscopic materials

I. A. Vartaniants

DESY, Hamburg, Germany

National Research Nuclear University, MEPhI, Moscow, Russia

Mezoscopic materials are important for the modern technology. Understanding of internal structure and dynamics is important for understanding the functionality of these materials. The difficulty of imaging of these materials lies in different length scales typically present in them. One of the representative class of such materials are photonic crystals.

Photonic crystals are important materials for the development of the present technology. They serve as photonic band gap materials in a wide range of light frequencies. Understanding the structure and dynamics of these materials with nondestructive methods is of high importance for different applications of these novel materials. In this talk I will present our studies of the structure of colloidal crystals performed by coherent x-ray diffraction imaging method (CXDI). It will be demonstrated how arrangements of particles as well as individual defects can be visualized in 2D and 3D colloidal crystals with high resolution CXDI. Next, I will present studies of the colloidal crystals structure under incremental heating and in the end will discuss results of the pump-probe experiments performed at free-electron laser LCLS in Stanford.

Polarized neutrons and magnetism

A. Gukasov

Leon Brillouin Laboratory, CEA-CNRS, France

The use of magnetism is widespread and can be found in the strategically important industries, such as energy, health, transport and information technology. The understanding of magnetic structures is crucial for our understanding of how magnetism can couple to the atomic lattice or to charge degrees of freedom. Magnetic neutron diffraction is the leading and unbeaten experimental method to study magnetic structures and provides information that cannot be obtained by any other method. Particularly useful in this respect is the neutron diffraction from single-crystals because of its higher sensitivity to small magnetic signals. Neutron diffraction is particularly powerful when used with polarized neutrons. In the talk recent experiments illustrating the current state of the art in neutron diffraction will be presented as well as the challenges in this domain on the European Spallation Source under construction.

XAFS spectroscopy: fundamentals, experiment, data analysis, application examples and recent extensions

K. Klementiev

MAX IV Laboratory, Lund, Sweden

The lecture provides an introduction into the x-ray absorption technique and comprises elements of theory, X-ray optics, measurement modes and data analysis. The two constituent parts – near-edge (XANES) and extended (EXAFS) fine structures – are considered. The applicability to various sample types and the choice of measurement mode are discussed. An application of EXAFS to in-situ catalysis research is exemplified. Recent trends for instrumental enhancement are provided as well.

XAFS-спектроскопия: основы, эксперимент, анализ данных, примеры применения и недавние расширения

К. Клементьев

MAX IV Laboratory, Лунд, Швеция

Лекция является введением в методику спектроскопии рентгеновского поглощения и включает в себя первичные сведения из теории, рентгеновской оптики, методов регистрации и анализа данных. Рассматриваются две составные части методики – околопороговая (XANES) и дальняя (EXAFS) тонкая структура спектров поглощения. Анализируется применимость к различным типам образцов и выбор метода регистрации. Приводится пример применения EXAFS к in-situ исследованиям катализаторов. Также обсуждаются недавние тенденции по расширению инструментальных возможностей.

Physics of virus self-assembly and virus-like biological nanostructures

V. L. Lorman¹, S. B. Rochal²

¹ *Laboratoire Charles Coulomb, UMR 5221 CNRS – Université de Montpellier, France*

² *Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia*

Viruses are biological nano-systems occupying the gray area between living and non-living matter. In spite of the dependence of their life cycle, structure and functions on the information encoded in their genome, viruses undergo a whole series of transformations typical for passive physical systems. In all viruses the genome is protected by a solid protein shell (capsid) self-assembled from many copies of identical subunits (one or few proteins). The positions and orientations of subunits display high level of spatial organization well suited to modern structural methods of study like synchrotron radiation diffraction, cryoelectronic microscopy and atomic force microscopy. Recent physical and biochemical data raise a whole number of questions concerning unconventional positional order of subunits in the viral capsid shell, thermodynamics and physical mechanisms of the self-assembly, shape and mechanical stability of the shell.

In the present work we develop the theory which explains and classifies the capsid structures for viruses with spherical topology and icosahedral symmetry. We develop an explicit method which predicts the positions of centers of mass for the proteins, including the capsids of unusual viruses discovered quite recently, and explains the assembly thermodynamics. We show the relation between the protein density distributions obtained and the structures of several human viruses.

A virus entry into a host cell, the main component of its infective power, depends strongly on protein arrangement in a capsid. We discuss the collective property of virus infectivity using the generalization of condensed matter physics concepts and taking into account specific properties of proteins. Understanding of virus capsid organization and self-assembly mechanisms helps also to advance new methods in nanotechnology which use capsid self-assembly to produce virus-like nanoparticles for nano-encapsulation and drug delivery.

Микромагнетизм планарных наноэлементов

К. Л. Метлов

Донецкий физико-технический институт, Донецк, Украина

В электромагнитной картине мира микромагнетизму [1] отводится скромное место материальных соотношений, обозначающих связь между магнитной индукцией и магнитным полем. Связь эта, однако, не является простой функциональной зависимостью, а представляет собой нелокальный оператор с памятью, обусловленной значительным количеством метастабильных состояний. Это свойство магнетиков давно используются для создания разного рода запоминающих устройств. Потребности в их дальнейшей миниатюризации, а также успехи в развитии литографии, позволяющей теперь контролируемым образом создавать сложные планарные магнитные наноструктуры, ставят перед теорией микромагнетизма новые вопросы и открывают новые возможности.

После работ Т. Н. R. Skyrme, А. А. Белавина и А. М. Полякова стало ясно, что метастабильные магнитные состояния магнетика представляют собой топологические солитоны (или скирмионы). Хотя изолированные магнитные вихри в протяжённых ферромагнитных плёнках не наблюдались, более сложные структуры, представляющие собой линейные цепочки вихрей и анти-вихрей [2], известны достаточно давно [3]. В ограниченной же геометрии, когда плёнка имеет субмикронные поперечные размеры, изолированные скирмионы являются одним из основных состояний [4]. Такие состояния [5] и их динамика [6] могут быть приближённо описаны при помощи функций комплексной переменной как в односвязных, так и в многосвязных [7] магнитных наноструктурах. Этому описанию и посвящён данный доклад.

1. W. F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, New York: Wiley (1963).
2. K.L. Metlov, A simple analytical description for the cross-tie domain wall structure, *Appl. Phys. Lett.* 79 (16), 2609 (2001).
3. E. E. Huber, Jr., D. O. Smith, J. B. Goodenough, Domain-wall structure in Permalloy films, *J. Appl. Phys.* 29(3), 294 (1958).
4. K.L. Metlov, Young Pak Lee, Map of metastable states for thin circular magnetic nano-cylinders, *Appl. Phys. Lett.* 92, 112506 (2008).
5. K. L. Metlov, Magnetization patterns in ferromagnetic nano-elements as functions of complex variable, *Phys. Rev. Lett.* 105, 107201 (2010).
6. K.L. Metlov, Vortex mechanics in planar nano-magnets, *Phys. Rev. B* 88, 014427 (2013).
7. A.B. Bogatyrev and K.L. Metlov, "Magnetic states in multiply-connected flat nanoelements", *Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur*, v. 41, No. 10, pp. 984–988, 2015.

Андерсоновская локализация: мультифрактальность, симметрии, топологии и электрон-электронное взаимодействие

А. Д. Мирлин

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

В лекции будет представлен обзор современного понимания Андерсоновской локализации и прогресса в этой области, достигнутого в последнее время. В частности, к ключевым темам лекции относятся:

- мультифрактальность волновых функций вблизи перехода Андерсона металл-изолятор;
- роль симметрий в теории Андерсоновской локализации;
- роль топологии, классификация топологических изоляторов;
- Андерсоновская локализация и электрон-электронное взаимодействие.

Magnetism and Synchrotron radiation: towards the 4th generation light sources

A. Rogalev

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Current research in magnetism are driven by the fascinating physics of rather complex materials and by the industrial applications as is illustrated by the continuously increasing demands of the information technology. Advances in the synthesis of new materials and complex nano-scaled structures require increasingly sophisticated experimental techniques that can probe the electronic states, the atomic magnetic moments and the magnetic microstructures governing the properties of these materials.

At the same time, progress in synchrotron radiation techniques have provided unique capabilities for the study of magnetic phenomena. In particular polarization dependent *X*-ray spectroscopy and scattering appear to be a unique tool for measuring spin and orbital magnetization in element selective manner under multiple extreme conditions high pressure, low temperature and high magnetic field. Such experiments fully benefit from the high brightness of a third generation synchrotron source. Moreover, these sources make possible imaging of magnetic structures on a sub-micrometre scale.

An important aspect of magnetism research is dynamics of magnetization. On pico and femtosecond timescales such dynamics is probed by pump-probe experiments which are nowadays carried out using table-top femtosecond lasers and synchrotron light sources.

In this lecture I overview the main achievements in the magnetism research accomplished with 3rd generation synchrotron radiation sources and present the perspectives opened for magnetism community by availability of spatially coherent, ultra-short *X*-ray pulses with very high brightness at the 4th generation sources.

Закрученные фотоны и электроны как новый инструмент исследований в области физики атомов, ядер и элементарных частиц

В. Г. Сербо

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

В современной лазерной оптике хорошо известны так называемые «закрученные фотоны» (twisted photons). Речь идёт о таких лазерных пучках, в которых фотоны имеют отличное от нуля значение m проекции **ОРБИТАЛЬНОГО** момента импульса на ось движения пучка. Существует экспериментальная реализация состояний с проекцией $m = 200$. Недавно были получены пучки закрученных фотонов с энергией 99 эВ в спиральном ондуляторе установки BESSY II. В наших теоретических работах показано, что можно получить закрученные фотоны высокой энергии, используя обратное комптоновское рассеяние закрученных лазерных фотонов на ультрарелятивистских электронах.

Недавно несколько групп сообщили о получении закрученных электронов с кинетической энергией порядка 300 кэВ и орбитальным квантовым числом вплоть до значения $m = 3000$. Было достигнуто замечательное фокусирование электронного пучка закрученных электронов до величины фокального пятна 0,12 нм в диаметре. Обсуждаются эксперименты по ускорению таких электронов до энергий порядка 50 МэВ.

Закрученные фотоны и электроны могут представлять интерес в физике атомов, ядер и элементарных частиц, поскольку дают в распоряжение экспериментатора дополнительную степень свободы – заданное значение проекции полного момента импульса, отличное от ограниченного значения проекции спина частицы на ось движения.

В лекции дан краткий обзор результатов, связанных с получением и использованием закрученных частиц. В частности, обсуждаются необычные характеристики фундаментальных атомных процессов с закрученными фотонами и электронами (новые правила отбора, необычное угловое распределение и поляризация конечных частиц).

Эпитаксиальные гетероструктуры сложных оксидов

Ю. И. Юзюк

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Благодаря недавним достижениям в области синтеза оксидных гетероструктур с атомарно резкими границами оксидная электроника всерьез рассматривается, как альтернатива электронике полупроводниковой. В докладе рассматриваются современные технологии роста эпитаксиальных пленок и сверхрешеток сложных оксидов на различных подложках и анализируются перспективы создания наноразмерных гетероструктур с широким спектром потенциальных применений в оптоэлектронике, микроэлектромеханике и СВЧ электронике.

Структура и свойства, пленок и сверхрешеток, состоящих из наноразмерных эпитаксиальных слоев различных соединений существенно отличаются от свойств объемных керамик и кристаллов, и выяснение причин этих отличий является актуальной проблемой современной физики конденсированного состояния. В докладе представлены современные достижения теоретических подходов для расчетов фазовых состояний пленок и сверхрешеток сегнетоэлектриков со структурой перовскита, приведены результаты исследования динамики решетки и обсуждаются современные методы исследования их структуры с использованием синхротронного излучения.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является эффективным методом исследования тонких пленок, поскольку структурные изменения при фазовом переходе в сегнетоэлектрическое состояние, а также эпитаксиальные и термоупругие напряжения обычно сильно изменяют колебательный спектр гетероструктур. Использование микро КРС спектроскопии позволяет исследовать эффекты воздействия подложки и буферных слоёв, структурные изменения в пленках и сверхрешетках при изменении состава, толщины или температуры.

В докладе представлены результаты исследования кристаллической структуры и спектров КРС поликристаллических и эпитаксиальных пленок перовскитов. Анализируются размерные эффекты, особенности фазовых переходов в пленках и сверхрешетках. Обсуждаются методы инженерии эпитаксиальных напряжений на примерах сегнетоэлектрических пленок и сверхрешеток, обсуждаются новые явления, возникающие на интерфейсах наноразмерных эпитаксиальных слоев различных соединений.

Измерение структурной киральности синхротронным излучением высокой энергии

В. А. Дядькин

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Долгое время считалось, что для точного измерения абсолютной структуры, и соответствующей ей киральности, необходимо использовать рентгеновское излучение с длиной волны, близкой к границе резонансного поглощения атомов, занимающих в данной структуре нецентросимметричные позиции. На примере геликоидального магнетика MnSi (K-edge для Mn – 6,5 кэВ), будет показано успешное и безусловное определение абсолютной структуры на длине волны рентгеновского излучения 78 кэВ. Для данной длины волны будет дано сравнение достоинств и недостатков различных методик определения абсолютной структуры, таких как подсчёт параметров Флака и Парсонса, а также новый перспективный метод гамма-гистограмм.

Обзор российских заявок на линиях ESRF

В. А. Дядькин

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В лекции рассказывается о том, как стоит и как не стоит подавать заявки на эксперименты в ESRF. Будет дан обзор типичных ошибок, совершаемых пользователями, как при подаче заявки, так и при поведении на эксперименте и после него. Также, в интерактивном режиме, будет сделана короткая ретроспектива заявок, поданных российскими учёными в ESRF в предыдущем раунде.

Лекция предназначена для самых молодых участников школы, только собирающихся подавать заявки.

Ferromagnetism of Fe₆₀Al₄₀ thin films under a magnifying glass of hard X-rays

A. Smekhova^{1, 2}, *B. Eggert*², *B. Cöster*², *E. La Torre*², *Th. Szyjka*², *K. Ollefs*^{2, 6},
*R. Bali*³, *K. Potzger*³, *S. Cornelius*^{3, 4}, *M. O. Liedke*⁵, *J. Lindner*³, *S. Salamon*²,
*A. Rogalev*⁶ and *H. Wende*²

¹ *FZ Jülich, Peter Grünberg Institut (PGI-6), Berlin, Germany*

² *Universität Duisburg-Essen, Fakultät für Physik und CENIDE, Duisburg, Germany*

³ *Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, HZDR, Dresden, Germany*

⁴ *Delft University of Technology, Faculty of Applied Sciences, Delft, The Netherlands*

⁵ *Institute of Radiation Physics, HZDR, Dresden, Germany*

⁶ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Формирование дальнего ферромагнитного порядка в сплавах FeAl, наведенного химическим разупорядочением кристаллической решетки, интенсивно исследуется в течение более 40 лет [1]. В настоящее время это явление успешно используется для создания магнитных структур на основе тонких пленок Fe₆₀Al₄₀ с контролируемыми магнитными свойствами [2], приготовленных при помощи технологии ионного облучения. Однако до сих пор вопрос о наиболее существенной причине возникновения этого эффекта – локального окружения атомов железа [3] и/или изменений параметров решетки [4] – остается открытым.

В нашей работе методами элементно-селективной спектроскопии поглощения EXAFS и XMCD в жесткой рентгеновской области исследовались тонкие пленки Fe₆₀Al₄₀ (40 нм)/SiO₂/Si, приготовленные при помощи магнетронного напыления с последующим отжигом и облучением ионами Ne⁺ с энергией 20 кэВ как предложено в [2]. Предварительные XRD, MOKE и VSM магнетометрия показали, что облучение ионами разрушает химическое упорядочение в системе при сохранении структурной целостности, и что химически разупорядоченная A2 фаза обладает дальним ферромагнитным порядком, в то время как упорядоченная B2 фаза является парамагнитной.

Анализ EXAFS и XMCD спектров, измеренных на К крае поглощения Fe при комнатной температуре, показал, что увеличение химического беспорядка, обусловленного дозой облучения, ведет к кардинальному изменению ближайшего локального окружения атомов железа с преимущественным расположением атомов Fe в качестве ближайших соседей и к увеличению степени магнитной поляризации 4*p* состояний железа, определяющей его орбитальный момент. Вопрос о природе поляризации 4*p* состояний обсуждается.

Измерения на ESRF были проведены в рамках проекта HC-1811 на линии ID12.

1. G. P. Huffman et al., J. Appl. Phys. 38, 735 (1967).
2. R. Bali et al., Nano Lett. 14, 435 (2014).
3. L. Zamora et al., Phys. Rev. B 79, 094418 (2009).
4. J. Nogués et. al., Phys. Rev. B 74, 024407 (2006).

Стеновые доклады
Секция «Нейтронное рассеяние»

**Влияние примеси BaTiO₃ на существование несоизмерной фазы
в композитах (1-x)NaNO₂ + (x)BaTiO₃**

О. А. Алексеева¹, А. А. Набережнов^{1, 2}, Е. В. Стукова³,
С. А. Борисов², В. Г. Симкин⁴

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Амурский государственный университет, Благовещенск, Россия

⁴ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Приведены результаты исследования влияния примеси титаната бария BaTiO₃ на температурный диапазон существования несоизмерной фазы нитрита натрия NaNO₂ в сегнетоэлектрических композитах (1-x)NaNO₂ + (x)BaTiO₃.

Диэлектрические исследования данных композитов при различной концентрации примеси ($x = 5$ и 10 об. %) и размере частиц ($3-5$ мкм и $5-30$ мкм) BaTiO₃ выявили ряд аномалий диэлектрического отклика [1]. Так, при нагреве на температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\epsilon'(T)$, помимо максимума, соответствующего фазовому переходу (ФП) в параэлектрическую фазу нитрита натрия при $T = 437$ К, на низких частотах существует максимум при температуре 420 К. При охлаждении величина данного максимума $\epsilon'(T)$ значительно меньше, чем при нагреве. Было сделано предположение, что существование максимума при нагреве связано с ФП сегнетоэлектрическая фаза – несоизмерная фаза в нитрите натрия, и таким образом, температурная область существования несоизмерной фазы NaNO₂ в композитах (≈ 18 К) существенно расширяется по сравнению с чистым NaNO₂ (≈ 1 К). Для проверки этого предположения мы провели исследования температурной эволюции структуры методом дифракции нейтронов в интервале температур $\approx 360-450$ К.

Проведена идентификация фазового состояния BaTiO₃ в указанном температурном интервале при нагреве и охлаждении. Не обнаружено изменения температуры Кюри или увеличения температурного гистерезиса при ФП в частицах BaTiO₃, что позволяет утверждать, что наблюдаемый в температурный максимум диэлектрического отклика композитов при $T = 420$ К не связан с ФП в частицах титаната бария. Обнаружено уменьшение параметра порядка в композите по сравнению с чистым NaNO₂ в температурном диапазоне $360-430$ К, из чего сделано предположение о сосуществовании несоизмерной и сегнетоэлектрической фаз в данном температурном диапазоне. Из разницы температурных зависимостей параметра порядка в чистом NaNO₂ и композите сделаны оценки доли несоизмерной фазы NaNO₂ в композите при различных температурах.

1. Стукова Е.В., Королева Е.Ю., Трюхан Т.А., Барышников С.В. Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. №4(158), с. 22 (2012).

Спиральная спиновая структура и квантовая критичность в $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$

*Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, А. С. Суханов^{1, 2}, S.-A. Siegfried³, А. Heinemann³,
А. В. Цвященко⁴, 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 *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

⁴ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

Магнитная система соединений $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с кубической структурой типа B20 упорядочивается в геликоидальную спиновую структуру с волновым вектором $k \approx 2 \text{ нм}^{-1}$ при концентрациях $x < 0,45$ [1, 2]. Волновой вектор k уменьшается на порядок скачком при $x > 0,45$ [1]. На наш взгляд это указывает на переход от геликоидальной магнитной структуры, основанной на взаимодействии Рудермана-Киттеля-Касуйи-Иосиды (РККИ), к геликоидальной структуре, основанной на взаимодействии Дзялошинского-Мория (ДМ), при $x_c = 0,45$.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) показано, что магнитная структура беспримесного MnGe , представляющая собой спиновую спираль, устойчива при низких температурах. Анализ профиля функции рассеяния нейтронов показал, что с ростом концентрации Fe возникают флуктуации спиральной фазы даже при $T = 0$, и что они преобладают над устойчивой магнитной структурой при $x > 0,25$.

Таким образом, можно сделать вывод о квантовом фазовом переходе в $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с ростом x , вызванным конкуренцией двух различных взаимодействий. РККИ взаимодействие является основополагающим для магнитной структуры соединений с $x < 0,45$. В частности, именно РККИ взаимодействие определяет короткий период спирали и его слабые изменения с концентрацией x . Очевидно, что ДМ взаимодействие, обусловленное нецентросимметричным расположением магнитных атомов, при этом подавлено. Его роль в беспримесном соединении MnGe еще предстоит выяснить в будущих экспериментах. Влияние взаимодействия Дзялошинского-Мории растет с замещением Mn атомами Fe в $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$. Оно приводит к полной дестабилизации магнитной структуры и квантовой критической точке при $x_{c1} = 0,25$. Следует отметить широкий температурный диапазон, от $T = 0$ К вплоть до $T = 60\text{--}80$ К, в котором геликоидальные флуктуации магнитной структуры соединений можно считать квантовыми. Дальнейший рост концентрации Fe в соединении $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ приводит к исчезновению геликоидальной магнитной структуры, основанной на РККИ взаимодействии, и формированию геликоидальной структуры, основанной на ДМ взаимодействии при $x_{c2} = 0,45$.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-22-01073-офи_м.

1. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 207201 (2013).

2. E.V. Alтынbaev et al., Phys. Rev. B **90**, 174420 (2014).

Исследования параметров взаимодействия содиум олеата и полиэтиленгликоля в водных растворах методом малоуглового рассеяния нейтронов и нейтронной рефлектометрии

А. П. Артикульный^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 2}, Л. А. Булавин², М. В. Авдеев¹

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Дубна, Россия*

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

Исследования водных растворов поверхностно-активных веществ (ПАВ) и полимеров актуальны для академических и промышленных целей. Специфика физико-химических и реологических свойств комплексов ПАВ и полимеров в растворе дает возможность широко применять такие системы для стабилизации коллоидных систем, манипулировать поверхностными свойствами дисперсных систем.

Содиум олеат (СО), $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CHCH}(\text{CH}_2)_7\text{COONa}$, анионный ПАВ, успешно применяется для стабилизации коллоидных растворов карбоновых наноструктур, производства водных суспензий магнитных наночастиц, доставки лекарств в организме. Свойства биосовместимости магнитных жидкостных систем стабилизированных слоем СО, обеспечиваются модификацией поверхности магнитных наночастиц слоем водорастворимого полимера полиэтиленгликоль (ПЭГ) $\text{H}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_n\text{OH}$.

Данная работа посвящена исследованию параметров структуры и взаимодействия комплексов содиум олеат – полиэтиленгликоль в водном растворе методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), нейтронной рефлектометрии, измерения поверхностного натяжения.

1. V.I. Petrenko, M.V. Avdeev et al., J Colloids and surfaces A 191–196, 480 (2015).

Ядерно-физические методики анализа на базе нейтронного генератора НГ-150 в ИЯФ АН РУ (Ташкент)

А. Г. Бажажин¹, О. Ш. Жураев², В. А. Татарчук²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ФВЭ,
коллорабация ТРС МРD/NICA, Дубна, Россия

² Лаборатория ядерных реакций Института ядерной физики АН Республики Узбекистан,
Ташкент, Узбекистан

В ИЯФ на НГ-150 проводят исследования в области ядерной, радиационной физики и элементного анализа с использованием потоков быстрых нейтронов.

НГ-150, разработки НИИЭФА (Санкт-Петербург), генерирует нейтроны с $E_n \approx 14$ МэВ и выходом до $2 \cdot 10^{10}$ н/с в 4π при монохроматичности не хуже 100 кэВ FWHM (по реакции $T(d,n)^4He$), и по реакции $D(d,n)^3He$ с $E_n \approx 2,5$ МэВ при выходе нейтронов ~ на два порядка ниже, чем в первой реакции.

Основные приложения НГ-150:

– На базе НГ-150 создана установка для on-line анализа образцов различного типа на содержание и определение профилей концентрации всех изотопов *H* и *He* в приповерхностных слоях (толщиной до нескольких сотен μm) методом рассеяния быстрых нейтронов (NERD) с использованием полупроводникового ΔE-E - метода регистрации и идентификации. NERD был предложен и создан в ИЯФ. Он базируется на измерении спектров энергии ядер отдачи анализируемых изотопов *H* и *He*, которые выбиваются из образцов нейтронами с $E_n \approx 14$ МэВ, при этом потеря первоначальной энергии ядра отдачи после вылета из образца позволяет неdestructивным способом определить глубину его залегания.

– **Нейтронно-активационный анализ на быстрых нейтронах** с $E_n \approx 14$ МэВ (AAFN), основанный на использовании пороговых ядерных реакций (n,p), (n,d) и ($n,2n$) с последующим временным и амплитудным анализом γ-спектров от активированных проб. Для активационного анализа имеется γ-спектрометр и сцинтилляционный спектрометр γγ-совпадений, сопряженный с управляемыми программой счетчиками импульсов, разработанных в ИЯФ.

– Содержание элементов определяется методом регистрации «мгновенного» γ-излучения ядерных реакций (PIGE), когда $T^{1/2}$ активируемых для анализа радиоизотопов малы, и транспортировка облученного образца в позицию измерений невозможна, при этом измеряются спектры γ-квантов от пробы непосредственно в процессе её облучения потоком быстрых нейтронов. Для анализа короткоживущих радионуклидов смонтирована пневмопочта для подачи образцов после облучения в измерительную установку.

Методы определения характеристик полупроводниковых кремниевых детекторов заряженных частиц с использованием потока быстрых моноэнергетических нейтронов

А. Г. Бажажин¹, О. Ш. Жураев², Ф. Х. Эргашев², В. А. Татарчук²

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ФВЭ, коллаборация TRC MPD/NICA, Дубна, Россия*

² *Лаборатория ядерных реакций Института ядерной физики АН Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан*

В ядерно-физических экспериментах на ускорителях для идентификации и спектрометрии заряженных частиц и в других задачах используются полупроводниковые кремниевые детекторы с толщинами от десятков микрометров до нескольких миллиметров. Используемые детекторы функционально делятся на два типа: детекторы ионизационных потерь («пролетные» или полностью обедненные) и детекторы полного поглощения.

Основными характеристиками детекторов являются энергетическое разрешение и толщина чувствительной области. Энергетическое разрешение обычно определяется по спектрам α -частиц от образцовых α -источников. Для определения толщины чувствительной области используют источники конверсионных электронов, имеющих большую длину пробега в кремнии, но большой угловой и энергетический страгглинг часто не дает реализовать необходимую точность измерения.

Для случая больших толщин, где непригодно использование α - и конверсионных источников, создан метод её измерения с использованием потока быстрых моноэнергетических нейтронов с $E_n \approx 14$ МэВ, генерируемых нейтронным генератором НГ-150 ИЯФ АН РУ по реакции $T(d,n)^4He$. Метод основан на анализе ядерных реакций $^{28}Si(n, p)^{28}Al$ и $^{28}Si(n, \alpha)^{25}Mg$, происходящих в материале детектора. Для калибровки метода необходимы «реперные» кремниевые детекторы с известными характеристиками. Метод также позволяет измерить «объемное» энергетическое разрешение детектора благодаря большой проникающей способности нейтронов.

Для измерения толщин «пролётных» кремниевых детекторов используется поток протонов отдачи от водородосодержащей полимерной плёнки (например, полиэтилен), расположенной между источником нейтронов от НГ-150 и исследуемым детектором.

Эти методы являются альтернативой или существенным дополнением к методикам определения толщины чувствительной области и энергетического разрешения кремниевых детекторов с использованием стандартных α -, β - и γ -источников.

Изучение структурных превращений в электродах литий-ионных аккумуляторов в процессе работы с помощью нейтронной дифракции

И. А. Бобриков¹, О. Ю. Иваньшина^{1,2}, С. В. Сумников¹,
Н. Ю. Самойлова¹, А. М. Балагуров¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

В работе показаны возможности нейтронной дифракции на дифрактометрах реактора ИБР-2 для исследования современных электродных материалов литий-ионных аккумуляторов в режиме реального времени (*in-operando*). Представлены примеры исследований электродов в коммерческих литий-ионных источниках постоянного тока [1], а также результаты исследований электродов с использованием специальных электрохимических ячеек, разработанных и изготовленных в ЛНФ ОИЯИ. Подробно рассмотрена конструкция электрохимической ячейки для времяпролетного (TOF) нейтронного дифракционного эксперимента. Эксперименты выполняются на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) в режиме высокой интенсивности и на Дифрактометре реального времени (РТД) реактора ИБР-2 с разрешающей способностью $R \approx 0,01$.

Работа поддерживается Российским научным фондом проект №14-12-00896.

1. I.A. Bobrikov, A.M. Balagurov, Chih-Wei Hu, Chih-Hao Lee, Sangaa Deleg, D.A. Balagurov "Structural evolution in LiFePO₄-based battery materials: *in-situ* and *ex-situ* time-of-flight neutron diffraction study" *Journal of Power Sources*, 2014, v. 258, pp. 356-364.

SANS исследование магнитной киральности в $Mn_{1-y}(Fe_{1-x}Co_x)_ySi$

А. А. Быков¹, Е. В. Алтынбаев^{2, 1}, S. Siegfried³, Д. А. Дядькин⁴, С. В. Григорьев^{1, 2}

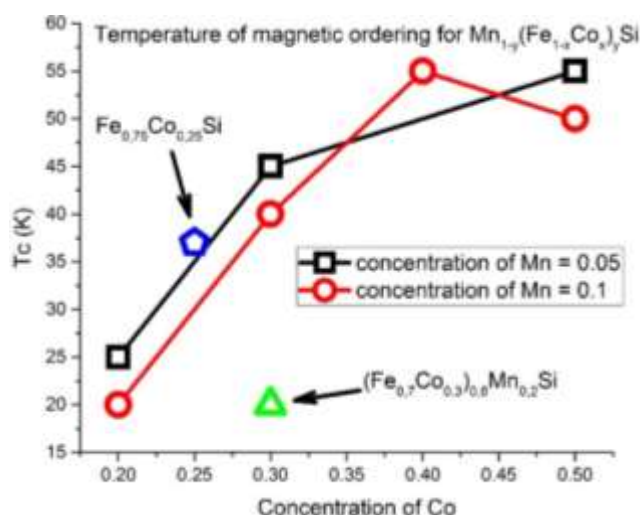
¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

В геликоидальном магнетике с взаимодействием Дзялошинского – Мория (ДМ) силициде марганца $MnSi$ методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов проведено исследование магнитной киральности. Были получены температурные и полевые зависимости свойств магнитной спирали в монокристаллах $Mn_{1-y}(Fe_{1-x}Co_x)_ySi$ ($x = 0,2-0,5$; $y = 0,8-1$), а также зависимости критической температуры и полей от концентраций примесей. Вычислены значения произведений магнитной и структурной киральностей.



*Зависимости температур магнитного упорядочения
для различных концентраций марганца и кобальта*

1. Dyadkin V.A. et al. // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84, № 1. P. 014435.
2. Grigoriev S. V et al. // Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. 2010. Vol. 81, № 1. P. 2–5.
3. Grigoriev S. V. et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 110, № 20. P. 207201.
4. Dmitriev V. et al. // J. Phys. Condens. Matter. 2012. Vol. 24, № 36. P. 366005.
5. Siegfried S.-A. et al. // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 91, № 18. P. 1–4.

Кристаллическая и магнитная структура сложных манганитов-мультиферроиков Yb-Sr-Mn-O₃

Э. О. Быков^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, А. Л. Малышев¹

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

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

Семейство RMnO_3 редкоземельных манганитов в настоящее время представляет повышенный интерес благодаря возможности широкого управления электрическими и магнитными свойствами, что делает их перспективными для использования в электронике и спинтронике. Более сложные материалы (например, исследуемые в данной работе легированные соединения $\text{Yb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$) дают большую возможность влияния на их характеристики. Благодаря легированию гексагонального YbMnO_3 ионами большего радиуса можно перейти от гексагональных мультиферроиков к ромбическим. Сосуществование фаз различной симметрии позволяет исследовать физику различных мультиферроиков на одном образце и наблюдать взаимодействие между ними.

Использование нейтронографического метода исследования обусловлено тем, что амплитуды рассеяния нейтронов на элементах, входящих в состав образцов, сильно отличаются как по величине, так и по знаку (Mn). Кроме того, в рамках одного эксперимента возможно провести изучение кристаллической и магнитной структур.

В работе проведены исследования 3-х образцов $\text{Yb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0; 0,18; 0,40$). Нейтронограммы измерены на порошковом нейтронном дифрактометре SSPD на 9 канале реактора ВВР-М (НИЦ «КИ» ПИЯФ). YbMnO_3 – однофазный с гексагональной структурой *P6₃cm*. В образцах $\text{Yb}_{0,82}\text{Sr}_{0,18}\text{MnO}_3$ $\text{Yb}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{MnO}_3$ обнаружена и вторая фаза – ромбическая *Pbnm*. Показано, что легирование стронцием частично преобразует гексагональную структуру в более плотно упакованную ромбическую перовскитную фазу. Таким образом, обнаружено микроструктурное фазовое разделение манганитов-мультиферроиков. Соотношение фаз прямо зависит от степени легирования. Для обеих фаз уточнены кристаллические структуры, а также определены магнитные, формирующиеся при низкотемпературных магнитных упорядочениях.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 16-02-00360.

Структурное исследование магнитных жидкостей на рефлектометре GRAINS на реакторе ИБР-2

*И. В. Гапон^{1,2}, Л. А. Булавин², В. И. Петренко^{1,2}, М. В. Авдеев¹, Р. Корцанский³,
М. Коперачка³, V. Zavisova³, Ю. Н. Хайдуков⁴, О. Soltwedel⁴*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Košice, Slovakia

⁴ Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany

Магнитная жидкость (МЖ) является коллоидной системой магнитных наночастиц в растворителях различной полярности. Слои ПАВ часто используются для стабилизации таких систем. Большой интерес к этим системам связан с возможностью их использования для контролируемой доставки лекарств, диагностики и лечения различных заболеваний, например, рака. Таким образом, исследование биосовместимых МЖ очень актуальны. В то же время поведение магнитных наночастиц в объеме и на интерфейсах могут быть очень разными в связи с конкретными адсорбционными свойствами МЖ. Также остается открытым вопрос о возможных различиях в устойчивости магнитных жидкостей в объеме и на интерфейсах.

Целью данного исследования было изучение адсорбционных свойств МЖ на водной основе на границе с твердой поверхностью (кремний) на новом многофункциональном нейтронном рефлектометре GRAINS с горизонтальной плоскостью образца размещённом на реакторе на ИБР-2. Информация о структуре МЖ в объеме была получена методом малоуглового рассеяния нейтронов. Также, было поставлено несколько экспериментов по нейтронной рефлектометрии для магнитных жидкостей, с различными концентрациями и методами синтеза, на границе с кремнием. Мы исследовали влияние гравитации на адсорбционные свойства. Было показано, что только одиночные магнитные наночастицы, покрытые молекулы ПАВ, адсорбируются на поверхности кремния. Этот факт коррелирует с результатами N-Res рефлектометра реактора FRM-2 (Германия). Это дает возможность говорить о достоверности данных, полученных на рефлектометре GRAINS реактора ИБР-2.

Исследование спиновой структуры сотообразного слоистого антимоноата $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$

А. Н. Коршунов^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, А. Л. Малышев²

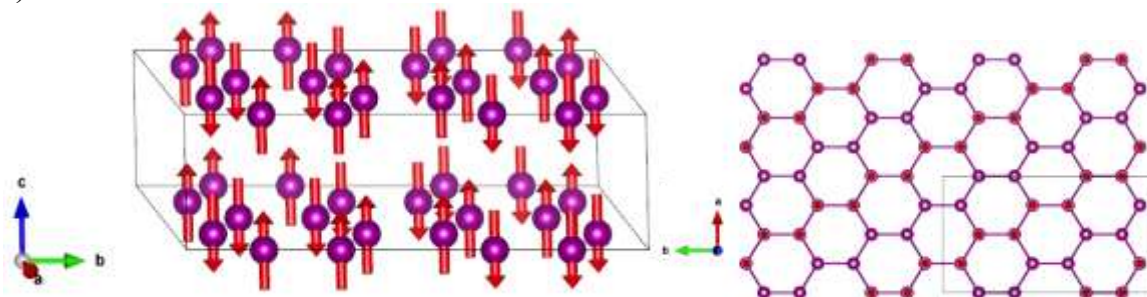
¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

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

Представлено изучение магнитного упорядочения $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ соединения на основе экспериментальных данных, полученных на порошковых нейтронных дифрактометрах SSPD (ПИЯФ, Гатчина) и G4.1 (LLB, Saclay, France) с последующим полнопрофильным анализом.

К большому разнообразию магнитных свойств слоистых оксидов во многом приводят сильная анизотропия магнитных взаимодействий внутри слоя, разные варианты взаимного расположения слоев, упорядоченность этого расположения, изменение расстояний между магнитно-активными слоями и т. п. Добавление к АФМ обменному взаимодействию с ближайшим окружением фрустрированного взаимодействия со вторым и третьим соседом, а также квантовые поправки, могут приводить к сложным спиновым структурам.

В результате проведенных исследований было показано, что магнитная структура соразмерна с кристаллической и описывается вектором распространения $k = (1/2, 1/2, 0)$. При этом она имеет вид ферромагнитных зигзагоподобных цепочек, которые антиферромагнитно связаны между собой (рис).



*Модель спиновой структуры ионов никеля в $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$:
(a) объемное изображение; (b) слой Ni_2SbO_6*

Показано, что дифракционные данные для $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ находятся в согласии с результатами измерений температурных зависимостей намагниченности и магнитной восприимчивости. Важным результатом является экспериментальное обнаружение того, что межслоевое взаимодействие в данной системе является ферромагнитным, а не антиферромагнитным как полагали ранее на основе теоретических расчетов [1].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 16-02-00360.

1. E.A. Zvereva, M.I. Stratan, Y.A. Ovchenkov et al., Phys. Rev. B 92, 144401 (2015).

Нейтронное дифракционное исследование новой структурной формы треугольного антимоната MnSb_2O_6

*М. Д. Кучугура^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, А. Л. Малышев²,
О. П. Смирнов², В. Б. Налбандян³*

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

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

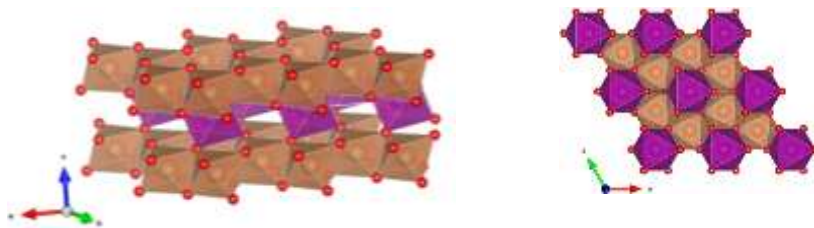
³ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В кристаллографической треугольной геометрии при заполнении соседних позиций АФМ связанными магнитными атомами происходят фрустрации низкотемпературных магнитных состояний из-за конкуренции спиновых взаимодействий. Совсем недавно было проведено исследование соединения MnSb_2O_6 , магнетика с киральной тригональной кристаллической структурой [1]. Новая форма слоистого антимоната MnSb_2O_6 (P-31m) отлична от известного мультиферроика (P321) [1] и относится к низкоразмерным спиновым фрустрированным системам.

Измерения нового MnSb_2O_6 проводились в ПИЯФ на дифрактометрах SSPD ($\lambda = 1,753 \text{ \AA}$) при $T = 300 \text{ K}$ и PD ($\lambda = 1,366 \text{ \AA}$) при $T = 4 \text{ K}$, что для данного образца ниже температуры Нееля. Обработка экспериментальных данных по методу Ритвельда подтвердила однофазность стехиометрического состава и позволила описать детали кристаллической структуры (рис.).

Главное отличие нашей новой формы MnSb_2O_6 от известной заключается в позициях Sb, смещенных на $c/2$ от слоя Mn к пустым октаэдрам слоя SbO_6 . Это проявляется в расширении в a -направлении (из-за увеличения числа коротких Sb^{5+} - Sb^{5+} связей) и сжатии вдоль c . Поэтому Mn-O и Sb-O длины связей немного больше, чем соответствующие суммы ионных радиусов. Оба структурных типа MnSb_2O_6 высоко упорядочены из-за большой разницы в формальных зарядах Mn и Sb катионов.

Нейтронные измерения при 4 К подтвердили наличие магнитного упорядочения. Несмотря на довольно простую кристаллическую структуру соединения MnSb_2O_6 , у него достаточно сложная магнитная структура с несоизмерным вектором распространения $\mathbf{k} = (1/3, 1/3, 1/5-\delta)$.



Кристаллическая структура тригонального (P-31m) MnSb_2O_6

Исследование профинансировано РФФИ проектом № 16-02-00360-а.

1. Johnson, R.D.; Cao, K.; Chapon, L.C. et.al *Phys. Rev. Lett.* **111**, 017202 (2013).

Исследования веществ и фундаментальных процессов методом бета-ЯМР

Д. В. Львов^{1,2}, Ю. Г. Абов^{1,2}, А. Д. Гулько¹, Ф. С. Джебпаров^{1,2}, О. Н. Ермаков¹

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

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

Метод бета-ЯМР (ядерный магнитный резонанс и релаксация поляризованных бета-активных ядер) был предложен сразу после открытия несохранения четности в слабых взаимодействиях. Суть метода бета-ЯМР заключается в циклическом создании в исследуемых образцах с помощью реакции захвата тепловых поляризованных нейтронов ансамбля поляризованных бета-активных ядер с последующим наблюдением временной эволюции их поляризации. Угловое распределение β -излучения описывается соотношением $w(\vartheta) = 1 + a \cos \vartheta$, где ϑ – угол между импульсом бета-частицы и спином ядра. Измеряется угловая (0 – 180°) асимметрия бета-излучения ядер – разность числа частиц, вылетающих по и против направления спина, отнесенная к их сумме.

Поляризованные бета-активные ядра в среде являются прекрасными зондами локальных полей различной природы, среди источников которых, в первую очередь, следует указать сверхтонкие магнитные и электрические взаимодействия, а также диполь-дипольные взаимодействия. Возможно проведение исследований во всех типах конденсированных сред: кристаллах, стеклах, жидкостях и т.д.

В докладе будут представлены результаты, полученные методом бета-ЯМР, по двум направлениям [1, 2]:

- 1) Исследование радиационных дефектов.
- 2) Исследование процесса случайных блужданий в неупорядоченных средах.

Также будут показаны перспективы дальнейшего развития метода бета-ЯМР.

1. Ю. Г. Абов, А. Д. Гулько, Ф. С. Джебпаров, О. Н. Ермаков, Д. В. Львов, А. А. Любарев, ЯФ, 2014, т. 77, с. 721.

2. Yu. G. Abov, F. S. Dzheparov, A. D. Gulko, D. V. Lvov, Appl Magn Reson, 2014, v. 45, p. 1205.

Магнитные возбуждения в мультиферроике $\text{NdFe}_3(\text{VO}_4)_3$: исследование методом неупругого рассеяния нейтронов

П. Г. Матвеева^{1, 2}, А. К. Овсяников^{1, 3}, М. Воейт⁴,
И. В. Голосовский¹, 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

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

⁴ Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

В данной работе представлены результаты экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов на мультиферроике $\text{NdFe}_3(\text{VO}_4)_3$ и первые расчеты. В элементарной ячейке этого соединения (SG R32) 3 атома железа, которые занимают кристаллографическую позицию 9d и один атом неодима в позиции 3a. Магнитную структуру можно представить как систему ферромагнитных плоскостей, направление магнитных моментов в которых, меняются от плоскости к плоскости вдоль оси c . Магнитная ячейка получается удвоением химической вдоль оси c (вектор распространения $[0\ 0\ \frac{1}{2}]$) [1]. В магнитную ячейку входит 24 магнитных атома, таким образом, максимально возможное число ветвей в спектре 24.

Первые измерения, проведенные на спектрометре IN22 (Институт Лауэ-Ланжевена) показали присутствие одной сильной ветки. Недостаточная светосила и разрешение спектрометра не позволили идентифицировать другие ветки. Поэтому в 2015 году были предприняты новые эксперименты на новом спектрометре Thales (Институт Лауэ-Ланжевена). Этот прибор находится на «холодном» нейтроноводе и обладает большей светосилой и, главное, лучшим разрешением.

Теоретический анализ спектров проводился в рамках представления Дайсона-Малеева в приближении свободных спиновых волн. При этом рассматривались следующие параметры обменного антиферромагнитного взаимодействия: наиболее сильное взаимодействие внутри цепочек железа вдоль оси c – J_1 , взаимодействие между цепочками – J_2 и взаимодействие J_3 между атомами неодима и железа в разных плоскостях. Также учитывалась анизотропия взаимодействия J_3 . Эта анизотропия может объяснить наблюдаемое расщепление низкоэнергетических веток спектра. Используя известные в литературе данные по анизотропии [2], получены следующие величины обменных параметров:

$J_1 = 0,56(1)$ мэВ, $J_2 = 0,067(8)$ мэВ, $J_3^z = J_3^y = 0,04(1)$ мэВ, $J_3^x = 0,027(5)$ мэВ, которые находятся в согласии с результатами, уже известными в литературе [3–4].

Планируется продолжить расчеты спектров магнонов, а также исследования других редкоземельных мультиферроиков-ферроборатов.

1. M. Janoschek, P. Fischer et al. PRB, 81, 094429, 2010.

2. A.M. Kuzmenko, A.A. Mukhin, V.Yu. Ivanov, L.N. Bezmaternikh, Solid State Phenomena, 190 (2012).

3. S. Hayashida, M. Soda et al., PRB, 92, 054402, (2015).

4. M. N. Popova, E. P. Chukalina et al., PRB, 75, 224435 (2007).

О магнитной структуре трехмерного нанoаналога спинового льда

*А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Шишкин², И. С. Дубицкий²,
Н. А. Григорьева¹, 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

Инвертированные опалоподобные структуры (ИОПС) получают заполнением пустот искусственного опала ферромагнитным материалом. Их магнитная структура представляет собой трехмерный искусственный аналог спинового льда. Для исследования интегральных магнитных характеристик использовали СКВИД-магнитометрию, а локальная магнитная структура была изучена методом малоугловой дифракции нейтронов.

Исследования намагниченности пленок показали, что магнитная структура пленки ИОПС толщиной 0,23 мкм является двумерной, а пленки ИОПС толщиной более 3 мкм – трехмерными магнитными структурами. Величина поля необратимости и поля насыщения резко возрастают при переходе от двумерной к трехмерной структуре, но практически не меняются при изменении толщины трехмерной структуры. Величина коэрцитивного поля растет с толщиной по логарифмическому закону, что, по нашему мнению, обусловлено возникновением лавинообразного процесса при перемагничивании структурных элементов ИОПС.

Исследования методом малоугловой дифракции нейтронов для образцов толщиной 3,5, 10 и 13 мкм показали, наличие нескольких магнитных подсистем внутри ИОПС, сформированных ее геометрическими особенностями. Для этих подсистем характерно незначительное возрастание коэрцитивной силы наряду с заметным ростом поля необратимости и поля насыщения с толщиной образца. Необходимость сохранения магнитного потока в каждом структурном элементе ИОПС приводит к скоррелированному перемагничиванию этих элементов при возрастании внешнего магнитного поля. В результате, кривая перемагничивания усредненная по всему образцу отличается от кривых перемагничивания отдельных подсистем внутри образца.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №14-22-01113 офу_м).

Определения микродеформаций в дисперсионно-упрочненных сталях

Б. Мухаметулы^{1, 2}, А. М. Балагуров², И. А. Бобриков²

¹ *Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Дифракция нейтронов применена для определения микродеформаций в образцах некоторых нержавеющей аустенитных дисперсионно-упрочненных сталей, используемых в реакторостроении. Образцы подвергались действию высоких температур (до 700 °С) в течение различного времени (до 12 часов). Эксперименты были выполнены на нейтронном дифрактометре высокого разрешения, действующего с использованием метода времени пролета. Проведенный анализ показал систематические изменения параметров и микродеформаций кристаллической решетки. Высокий уровень разрешающей способности дифрактометра позволил выявить некоторые важные дополнительные детали микроструктуры дисперсионно упрочненных сталей по сравнению с результатами, полученными ранее на дифрактометре с монохроматическим пучком нейтронов.

Сравнительный анализ структуры водных феррожидкостей, приготовленных на основе частиц Fe_3O_4 , CoFe_2O_4 и частиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$, по данным МУРН

*А. В. Нагорный^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 2}, М. В. Авдеев¹, О. И. Иваньков¹,
А. Г. Белоус³, С. А. Солопан³, А. Еленич³, Л. А. Булавин²*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Институт общей и неорганической химии им. В. И. Вернадского НАН Украины, Киев, Украина

Отдельный класс коллоидных систем представляют магнитные жидкости, или феррожидкости. Устойчивость к образованию агрегатов в них обеспечивается, как правило, наличием стабилизационной оболочки. Феррожидкости, которые проявляют хорошую стабильность, находят широкое практическое применение в разных технических и биомедицинских целях [1, 2]. Одним из основных направлений исследований, связанных с изучением феррожидкостей, является разработка новых и оптимизация существующих методов синтеза магнитных частиц [3]. Экспериментальное восстановление информации о структуре на наноразмерном уровне в получаемых коллоидных системах составляет неотъемлемую часть научных исследований.

В работе представлены результаты исследований методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) структуры водных феррожидкостей с разными частицами, включая магнетит, кобальт-феррит и их соединение $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ со структурой «ядро-оболочка». Благодаря добавлению полисорбата-80 в качестве поверхностно-активного вещества, магнитные жидкости демонстрируют высокую устойчивость к образованию мелких агрегатов. Метод вариации нейтронного контраста в рассмотренных образцах позволяет провести оценки однородности частиц в исследуемых жидкостях. Вместе с тем, наводятся оценки размеров магнитных частиц и параметры распределения их по размерам.

1. A. Belous, S. Solopan, O. Yelenich, S. Osinsky, L. Bubnovskaya, L. Bovkun Synthesis and Properties of Ferromagnetic Nanoparticles for Potential Biomedical Application // IEEE ELNANO 2014, Kyiv, 2014, P. 245–249. DOI: 10.1109/ELNANO.2014.6873922.

2. P. Kopcansky, M. Timko, J. Kovac, M. Vaclavikova, S. Odenbach. Journal of Physics: Condensed Matter. 20(20), 200301 (2008).

3. Solopan S., Yelenich O., Kolodiaznyi T., Greneche J., Belous A., «Influence of synthesis conditions on the properties of nanoparticles and core/shell structures based on Fe_3O_4 // “International conference on Oxide Materials for Electronic Engineering – fabrication, properties and applications” OМEE-2014” Ukraine, Lviv, May 26–30, 2014, P.83–84. DOI: 10.1109/OMEE.2014.6912350.

Исследование монеты времен правления Узбек хана методом нейтронной радиографии

К. М. Назаров^{1, 2}, Д. П. Козленко², С. Е. Кичанов², Е. В. Лукин²

¹ *Международный университет природы, общества и человека, Дубна, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Изучение археологических объектов является основным источником информации о прошлом человечества. Это даёт представление об уровне развития людей и их цивилизаций в исследуемом периоде. Одними из важнейших таких объектов являются монеты. Именно они дают информацию об экономически-политическом и технологическом состоянии изучаемой культуры.

В рассматриваемой работе были проведены исследования средневековой монеты Узбек хана (хан Золотой Орды в 1313–1341 гг.) методами нейтронной радиографии и томографии на специализированном канале 14 импульсного реактора ИБР-2М.

В данной работе представлены результаты анализа состава объекта и внутреннего строения, сделана трехмерная модель монеты с помощью нейтронной томографии.

1. Клоков В.Б., Лебедев В.П. 2004. Монетные комплексы трёх небольших поселений Нижнего Поволжья // ДПДР, вып. V. Н. Новгород.
2. Янина С.А. 1970. Монеты Золотой Орды из раскопок и сборов Поволжской археологической экспедиции на Царёвском городище в 1959–1962 гг. // Поволжье в средние века. М.
3. Anderson I.S., McGreevy R.L., Vilheux H.Z. (Eds.). Neutron Imaging and Applications: A Reference for the Imaging Community. Springer: New York, 2009.
4. P. Vontobel, E.H. Lehmann, R. Hassanein, G. Frei. Neutron tomography: Method and applications // Physica B: Condensed Matter, 385–386, 2006, 475–480.
5. Kozlenko D.P. Neutron imaging facility at IBR-2 high flux pulsed reactor: first results // Abstract book of the 10th World Conference on Neutron Radiography, Grindelwald, Switzerland 2014. P. 27.

Исследование спиновой динамики в YbFeO_3 с помощью неупругого рассеяния нейтронов

С. Е. Никитин^{1,2}, К. А. Шайхутдинов¹, А. А. Подлесняк³,
L. Wu³, E. Pomjakushina⁴, K. Conder⁴

¹ Институт физики СО РАН им. Л. В. Киренского, Красноярск, Россия

² Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

³ Quantum Condensed Matter Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA

⁴ Paul Scherrer Institute, Villigen PSI, Switzerland

В данной работе представлены результаты изучения влияния спин-переориентационного перехода на магнитную динамику монокристалла YbFeO_3 .

Амплитуда и форма магнитных ветвей железной подсистемы остаются неизменными, несмотря на спин-переориентационный переход, однако при этом происходит перераспределение интенсивностей данных ветвей. Подсистема железа с хорошей точностью описывается с применением подхода, развитого в работе [1]. Детальное исследование поляризационного фактора магнитного рассеяния, а также измерения намагниченности и расчеты в модели кристаллического поля показали, что направления спинов Yb^{3+} не меняется при спин-переориентационном переходе, однако в момент перехода меняется направление молекулярного поля, действующего на спины Yb^{3+} .

В экспериментах с энергией падающего пучка $E=3\text{мэВ}$ было обнаружено магнитное возбуждение имеющее форму континуума в направлении $(0,0,L)$ и бездисперсионное в направлениях $(H,0,0)$ и $(0,K,0)$, причем форма, интенсивность и положение данного возбуждения зависит от направления и величины магнитного поля. Данный спектр хорошо описывается в одномерной модели Изинга-Гейзенберга с общим Гамильтонианом

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z S_j^z + \varepsilon (S_i^y S_j^y + S_i^x S_j^x)) - H^z \sum_i S_i^z - \frac{1}{2} H^x \sum_i (S_i^+ + S_i^-)$$

где первый член соответствует обменному взаимодействию, а второй и третий члены – энергии продольного и поперечного магнитного поля.

1. Hahn, S. E., Podlesnyak, A. A., Ehlers, G., Granroth, G. E., Fishman, R. S., Kolesnikov, A. I., ... & Conder, K. (2014). Inelastic neutron scattering studies of YFeO_3 . *Physical Review B*, 89(1), 014420.

Исследования кристаллической и магнитной структур соединения DyCo_2 при высоких давлениях

*А. В. Руткаускас¹, Д. П. Козленко¹, Э. Бурзо^{2, 3}, П. Власик^{2, 4},
С. Е. Кичанов¹, Е. В. Лукин¹, Б. Н. Савенко¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Faculty of Physics, Babes-Bolyai University, Cluj-Napoca, Romania*

³ *Romanian Academy, Cluj-Napoca Branch, Cluj-Napoca, Romania*

⁴ *University of Medicine and Pharmacy "Iuliu Hatieganu", Physics Department, Cluj-Napoca, Romania*

Магнитные свойства соединений RCO_2 , где R – редкоземельный элемент или иттрий интенсивно исследуется с экспериментальных и теоретических точек зрения. При комнатной температуре соединения RCO_2 имеют кубическую структуру с пространственной группой $Fd\bar{3}m$, но ниже температуры Кюри T_c кубическая структура искажается. Когда R является немагнитным (R = Y, Lu и Sc), соединения являются парамагнетиками и проявляют метамагнитное поведение только в присутствии внешнего магнитного поля, но соединения с R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm имеют ферромагнитное упорядочение и моменты кобальта, близкие к $\sim 1,0 \mu\text{B}$ во всей серии RCO_2 . Это объясняется моделью молекулярного поля, индуцированного локализованными 4f-моментами. Исследования влияния давления на соединения RCO_2 могут дать дополнительную информацию о магнитном поведении кобальта в упорядоченной фазе.

В данной работе были проведены исследования соединения DyCo_2 методом нейтронной дифракции при высоких давлениях до 5 ГПа и в температурном диапазоне от 10 до 300 К. При нормальных условиях оба соединения имеют кубическую структуру с пространственной группой $Fd\bar{3}m$. При снижении температуры до 145 К в DyCo_2 происходит структурный фазовый переход из кубической $Fd\bar{3}m$ в тетрагональную $I41/amd$, который также сопровождается изменением магнитного состояния из парамагнитного в ферромагнитное. Было обнаружено уменьшение температуры Кюри и подавление магнитного состояния ионов Co при высоком давлении.

Работа поддержана грантом РФФИ № 15-32-20358 мол_a_вед.

Квазиупругое рассеяние нейтронов на промежуточновалентном соединении SmB_6

П. С. Савченков^{1,2}, П. А. Алексеев^{2,1}

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

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

Проанализирована взаимосвязь магнитного формфактора, определяющего зависимость интенсивности магнитного рассеяния нейтронов и характера измеряемых в эксперименте спектров. На примере «классической» промежуточновалентной системы SmB_6 обсуждаются возможные проявления f -электронной нестабильности в составе и особенностях спектральной функции динамического магнитного отклика. Получены выражения для представления формфактора квазиупругой спектральной составляющей, позволяющие проанализировать влияние таких факторов, как эффективная температура электронной подсистемы и средняя валентность, на вид зависимости формфактора от передачи импульса при рассеянии нейтронов. Оказалось, что качественное отличие формфактора квазиупругого рассеяния в SmB_6 от формфакторов, полученных из анализа других дифракционных и спектроскопических нейтронных экспериментов, обусловлено вкладом от конфигурации f^5 , который в наибольшей степени присущ именно квазиупругой составляющей спектральной функции иона Sm в промежуточновалентном состоянии.

Работа поддержана грантом РФФИ 14-02-00272-а.

Исследование мезоскопической структуры $Mn_{1-x}Co_xGe$ методом малоуглового рассеяния нейтронного излучения

*И. А. Сафиулина^{1, 2}, Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2},
отв. за установку А. Heinemann³*

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

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

³ Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Munchen, Germany

Целью данной работы является исследование надатомной структуры моногерманидов переходных металлов, выращенных под высоким давлением [1].

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследована структура образцов $Mn_{1-x}Co_xGe$ с различной концентрацией твердого раствора x .

Эксперименты проводились на установке SANS-1 (MLZ, Munchen). При проведении эксперимента была выбрана следующая конфигурация инструмента. Рассеянные нейтроны регистрировались в диапазоне переданных импульсов Q от 0,01 до 0,1 \AA^{-1} с разрешением $\Delta Q/Q = 0,1$. Температура образца варьировалась в диапазоне от $T = 3$ К до $T = 300$ К с точностью 0,05 К.

В результате обработки экспериментальных данных, была получена зависимость $I(Q)$ для соединений $Mn_{1-x}Co_xGe$ при определенных значениях температуры – $T = 3-300$ К и параметра $x = 0,0-0,95$.

Экспериментальные кривые $I(Q)$ аппроксимировали выражением:

$$I(Q) = m/Q^n + A \quad (1),$$

где A – постоянная фона, m – шкальный фактор, n – показатель, связанный с фрактальной размерностью системы. Полученные кривые для всех образцов с $x = 0,0 - 0,95$ хорошо описываются выражением (1) со степенью $n = 2,96 \pm 0,01$. Полученная зависимость свидетельствует о том, что надатомная структура образцов характеризуется наличием дефектов с пространственной организацией, описываемой фрактальной моделью с логарифмической зависимостью плотности дефектов от расстояния.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-22-01073-офи_м.

1. A. V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).

Исследование структуры бицелл методом малоуглового рассеяния

*Д. В. Селиверстова^{1, 2}, А. И. Иванов^{2, 3, 4}, Д. В. Соловьев^{2, 3, 4},
В. И. Горделий^{2, 3}, Л. А. Булавин^{4, 5}, А. И. Куклин^{2, 3}, Т. Н. Муругова^{2, 3}*

¹ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

⁴ Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина

⁵ Институт проблем безопасности АЭС НАН Украины, Киев, Украина

В работе представлены результаты эксперимента по методу малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) и нейтронов (МУРН) на бицеллярных системах с целью исследования изменения параметров бицелл в процессе кристаллизации мембранных белков. Измерения были проведены на образцах с молярным отношением DMPC/CHAPSO = 2,7, разной концентрацией липидов и состава буфера при разной температуре.

Измерения были проведены на установке японской фирмы Rigaku (МФТИ, Долгопрудный) и спектрометре ЮМО (ОИЯИ, Дубна).

В результате проведенных экспериментов были получены зависимости интенсивности рассеяния бицелл от вектора рассеяния. В ходе обработки экспериментальных кривых рассеяния были аппроксимированы данные МУРР и МУРН для всех образцов без учета взаимодействия между бицеллами в растворе. Кривые рассеяния были аппроксимированы функцией бицелл и цилиндр с помощью программы *sasview*.

Эксперименты показали изменение структурных характеристик бицелл как с изменением концентрации липидов и состава буфера, так и с течением времени.

*Работа была поддержана Министерством образования и науки РФ.
Авторы благодарны программе «5 Top 100».*

1. Lucyanna Barbosa-Barros, Gelen Rodríguez, Mercedes Cócera, Laia Rubio, Joan Estelrich, Alfonso de la Maza and Olga López "Bicelles: New nano systems for skin applications". Barcelona, Spain, 2012.
2. C. Sanders, S. Prosser "Bicelles: a model membrane system for all seasons?" // Structure – 1998. – V. 6 – P. 1227–1234.
3. Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин «Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние». М.: «Наука», 1986.
4. SasView, <http://www.sasview.org/>

Аномалии динамики решетки гексаборидов редкоземельных металлов

Д. А. Серебrenников¹, Е. С. Клементьев^{1, 2}, П. А. Алексеев^{3, 4}

¹ *Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия*

² *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

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

⁴ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

Каркасно-кластерные структуры на основе бора представляют особый интерес в научной среде ввиду неординарности своего строения, а также многообразия физических свойств. Для соединений бора с металлическими элементами характерно наличие сильных ковалентных борных связей, формирующих жесткий каркас, внутри которого оказываются «запертыми» металлические ионы, колеблющиеся подобно энштейновским осцилляторам [1]. На дисперсионных кривых это проявляется в поведении акустических фононных мод, демонстрирующих постоянство энергии на большом волновом пространстве. Исключениями являются гексабориды тяжелых редкоземельных ионов, таких как GdB_6 , TbB_6 и DyB_6 , демонстрирующих аномальное смягчение акустических фононных мод в кристаллографических направлениях [100] и [110] при волновых векторах $q \approx (0.5, 0, 0)$ и $(0.38, 0.38, 0)$ г.л.у. соответственно [2].

В данной работе описана динамика решетки гексаборидов в низкоэнергетическом диапазоне с помощью модели суператома. Суть модели суператома заключается в выделении в кристаллической решетке устойчивых структурных единиц в виде борных кластеров и их замене одним суператомом. Данная модель позволяет пренебречь высокоэнергетическими степенями свободы в системе. При помощи данной модели описан эффект аномального смягчения в GdB_6 , TbB_6 и DyB_6 . На основе полученных результатов моделирования делается предположение о структурной неустойчивости данных соединений, вызванной взаимодействием редкоземельных ионов. Проанализирован характер нестабильности кристаллической решетки.

Благодарим за поддержку РФФИ, за проекты 14-22-01002-офи_м и 14-02-01096.

1. П.А. Алексеев, УФН 185 № 4 (2015).

2. K. Iwasa K et al. J. Phys. Soc. Jpn. 83 094604 (2014).

Влияние радиационного разупорядочения на структурное и магнитное состояния мультиферроика $\text{ViFe}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$

*М. А. Сёмкин¹, С. Г. Богданов², А. Е. Теплых²,
В. Д. Пархоменко², А. Н. Пирогов^{1, 2}*

¹ *Институт естественных наук, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Мы провели нейтронографические измерения на образце $\text{ViFe}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$. Облучение было проведено в реакторе ИВВ-2М (г. Заречный) при энергии нейтронов выше 0,2 МэВ. Обработка нейтронограмм проведена с помощью пакета программ Fullprof [1].

При синтезировании $\text{ViFe}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$ мы применяли цитратно-нитратный синтез с допированием марганца в подрешетку железа. Рентгенографический анализ показал, что в образце находится помимо основной фазы, примесная фаза силленита $\text{Vi}_{12,5}\text{Fe}_{0,5}\text{O}_{19,48}$. Кристаллическая структура образца хорошо описывается в рамках ромбоэдрической элементарной ячейки (пространственная группа $R\bar{3}c$), примесные фазы составляли не более 7 %.

В основной фазе параметры решетки a и c возрастают на 0,2 % и 0,4 %, когда флюэнс достигает, $\sim 2,0 \cdot 10^{19}$ н/см². Расчет нейтронограмм, облученных образцов $\text{ViFe}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$, показал, что помимо роста параметров решетки, заметных изменений других структурных параметров не наблюдается. Магнитная структура описывается вектором $k = (\delta; \delta; 0)$, где $\delta = 0,0032$.

Рост параметров решетки обусловлен накоплением радиационных дефектов. Наиболее вероятным типом дефектов, по нашему мнению, являются межузельные дефекты. Принимая во внимание результаты наших измерений полевых зависимостей намагниченности, можно предположить, что накопление дефектов вызывает появление ферромагнитной компоненты магнитного момента Fe/Mn ионов. Исходный (необлученный) феррит показывает полевую зависимость намагниченности, типичную для антиферромагнетика. Облучение быстрыми нейтронами и соответствующий рост параметров решетки приводит к возникновению намагниченности, особенно заметной в случае образца с флюэнсом $1,8 \cdot 10^{19}$ н/см². Полевая зависимость намагниченности для этого образца имеет вид характерный для ферромагнетика. Результаты, следует рассматривать как предварительные данные. Тем не менее, они дают порядок флюэнса ($10^{19} - 10^{20}$ н/см²) быстрых нейтронов, при котором можно ожидать возникновение спонтанной намагниченности $\text{ViFe}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$.

Работа частично поддержана программой «Поток» № 01201463334 и Министерством образования и науки РФ (госконтракт с УрФУ № 1362).

1. J. Rodriguez-Carvajal, Phys. B. 192, 55 (1993).

Исследование магнитных и структурных фазовых переходов в простых оксидах переходных металлов

С. В. Сумников, И. А. Бобриков, А. М. Балагуров

*Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка,
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Для исследования корреляции между свойствами атомной и антиферромагнитной структуры простых оксидов были изучены фазовые переходы в NiO и MnO методом нейтронной дифракции. Раздельное положение ядерных и антиферромагнитных пиков этих оксидов на дифрактограммах делает возможным детальный анализ температуры структурных и магнитных фазовых переходов. Эксперименты были проведены в широком диапазоне температур от 5 К и до 563 К на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) на импульсном реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна). Функция разрешения ФДВР $R = \Delta d/d$ в стандартном режиме работы близка к 0,001 и слабо зависит от d_{hkl} – это позволяет с высокой точностью определить параметры элементарной ячейки. Экспериментальные данные были получены от порошков NiO и MnO с размерами кристаллитов 138 нм и более. В обоих оксидах магнитный переход сопровождается структурным искажением, приводящим к понижению симметрии от кубической к ромбоэдрической. Из дифракционных данных мы смогли получить температуры структурного и магнитного фазового перехода, а также температурные зависимости для ромбоэдрической деформации и величины магнитного момента. Было установлено, что в MnO структурный и магнитный переход происходят при одинаковой температуре (в пределах экспериментальных ошибок) ($T_N = T_S = 122 \pm 1,7$ К). Но магнитный фазовый переход в NiO происходит при температуре на 47 ± 5 К выше, чем структурный ($T_N = 530 \pm 2$ К, $T_S = 483 \pm 5$ К). Насколько нам известно, этот факт еще не имеет точного теоретического объяснения.

Спин-волновая жесткость в MnSi: измерение методом малоуглового рассеяния нейтронов

*A. С. Суханов^{1, 2}, S.-A. Siegfried³, E. В. Алтынбаев^{1, 2}, A. Heinemann³,
С. В. Малеев², С. В. Григорьев^{1, 2}*

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

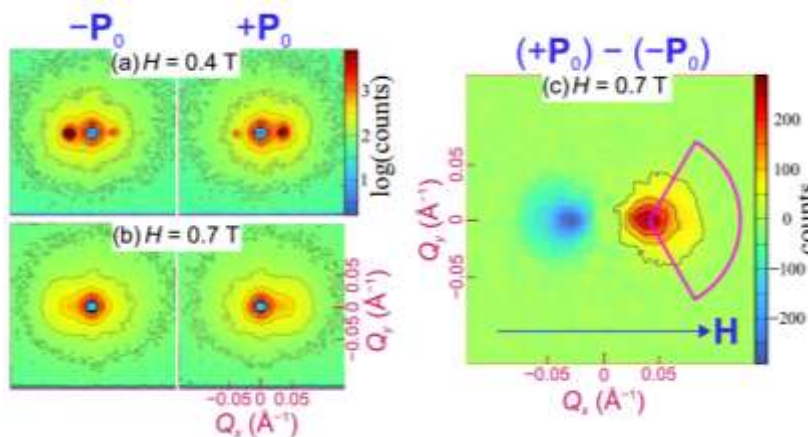
² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Конкуренция между ферромагнитным обменным взаимодействием и антисимметричным взаимодействием Дзялошинского-Мория (ДМ) приводит к появлению геликоидальной магнитной структуры в кубических соединениях с кристаллической структурой типа B20 [1]. Представителями таких соединений являются моносилициды и моногерманиды переходных металлов: MeSi, MeGe, где Me - Mn, Fe, Co, а также их твердые растворы.

В работе был развит метод, позволяющий измерять важный параметр спин-волновой динамики в гелимагнетиках, а именно, спин-волновую жесткость гелимагнонов с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Представляемый метод основан на анализе интенсивности рассеяния нейтронов на гелимагнетике в полях, превышающих значение критического поля H_{C2} , которое необходимо для перехода гелимагнитной структуры в индуцированную полем ферромагнитную фазу. Закон дисперсии спиновых волн в этом случае является существенно анизотропным:

$\varepsilon_{\mathbf{q}} = A(\mathbf{q} - \mathbf{k}_s)^2 + H - H_{C2}$, где A – жесткость спиновых волн [2]. Экспериментально показано, что малоугловое рассеяние нейтронов ограничено определенным углом отсечки (рис.) и угол отсечки зависит от приложенного магнитного поля и от спин-волновой жесткости системы. Значение угла отсечки и его полевая зависимость позволяют извлечь значение жесткости спиновых волн исследуемой системы.



Карты интенсивности малоуглового рассеяния, MnSi при $T = 15$ K и магнитном поле ниже H_{C2} (0,4 T) (a) и выше H_{C2} (0,7 T) (b) для поляризации P_0 против ведущего поля (левая колонка), и вдоль него (правая колонка). (c) Результат вычитания левой карты из правой при $H = 0,7$ T. Стрелкой указано направление приложенного поля

1. I. E. Dzyaloshinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1420 (1964).

2. O. Nakanishi, A. Yanase, A. Hasegawa, and M. Kataoka, Solid State Commun. **35**, 995 (19

Структурирование водных растворов эндофуллеренолов редкоземельных элементов

М. В. Суясова¹, Ю. В. Кульвелис¹, В. Т. Лебедев¹,
В. П. Седов¹, А. И. Куклин²

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Фуллерены представляют собой уникальный пример «кластерного» вещества, подавляющая часть которого находится в состоянии термодинамического равновесия в растворах в кластерной форме. При этом на скорость и степень агрегации оказывают сильное влияние не только свойства самих фуллеренов, свойства растворителей и процессы взаимодействия между ними, но также химия и структура поверхности, с которой соприкасается раствор. В большинстве статей не приводятся количественные показатели этого процесса, например, полнота агрегирования в корреляции с объемным составом смеси растворителей. В литературе в определенной степени изучено агрегирование индивидуальных фуллеренов C_{60} и C_{70} в гомогенных растворителях и смесях разнополярных растворителей, предложены простые модели, описывающие такие системы. Однако моделирование агрегации смеси различных фуллеренов, их водорастворимых производных, а также влияние инкапсулированного атома металла на структуру и формирование кластеров остается открытым вопросом.

В рамках описанных задач было проведено исследование характера структурирования водных растворов эндофуллеренолов $Gd@C_n(OH)_{40}$, $Tb@C_n(OH)_{40}$ и $Dy@C_n(OH)_{40}$ в зависимости от концентрации и рН-фактора по результатам малоуглового рассеяния нейтронов, вискозиметрии и кондуктометрии. В растворах наблюдались молекулярные фрактальные кластеры с фрактальной размерностью $\sim 2,5-4$, радиус корреляции которых составил 15–25 нм, а числа агрегации достигали $\sim 10^4$. Данное исследование имеет практическую значимость, в первую очередь, в связи с перспективами биомедицинского применения металло-углеродных структур. Зная состояние фуллеренолов в растворах и характер их кластеризации, можно управлять скоростью спиновой релаксации протонов в водном окружении фуллеренолов за счет регулирования размеров и строения агрегатов посредством контроля рН среды и добавления солей.

Переключение магнитной киральности в Ho/Y сверхструктуре

*V. V. Tarnavich¹, Ю. О. Четвериков¹, Е. Тартаковская², D. Lott³, S. Mattauich⁴,
А. Воробьев⁵, В. Капаклис⁵ и С. В. Григорьев^{1,6}*

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

² *Институт магнетизма НАН Украины, Киев, Украина*

³ *Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

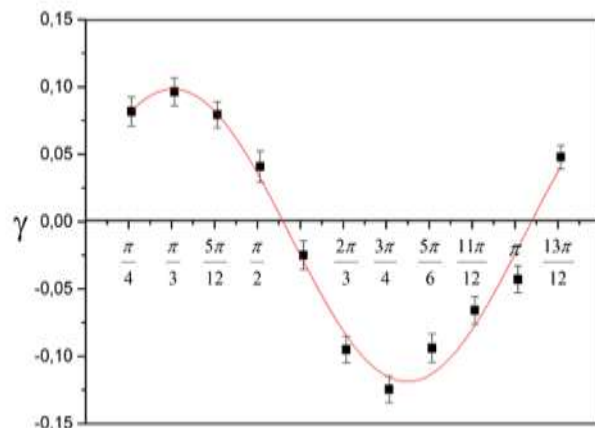
⁴ *Julich Centre for Neutron Science, Garching, Germany*

⁵ *Uppsala University, Uppsala, Sweden*

⁶ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Методом поляризованной нейтронной рефлектометрии ранее установлено нарушение киральной спиновой симметрии в Ho/Y сверхструктуре при охлаждении образцов ниже T_N во внешнем магнитном поле [1, 2]. Среднее значение киральности определялось как поляризационно-зависимая часть магнитного рассеяния нейтронов. Параметр γ , характеризующий нарушение киральной симметрии, скачкообразно возрастает при охлаждении образца ниже температуры Нееля T_N до величины γ порядка 0,10. Нарушение происходит непосредственно в момент фазового перехода из парамагнитной в геликоидальную фазу.

Настоящие результаты посвящены исследованию зависимости кирального параметра от ориентации образца во внешнем магнитном поле. Образец [Ho₄₅A/Y₃₀A], выращенный методом молекулярно-лучевой эпитаксии, имеет эпитаксиальную формулу $\{11\bar{2}0\}Al_2O_3 \parallel \{110\}Nb \parallel \{001\}Y \parallel \{001\}Ho/Y \parallel \{001\}Nb$. Эксперименты по рассеянию поляризованных нейтронов проведены на рефлектометре SuperADAM (ILL). Магнитное поле прикладывалось в плоскости образца, сам образец вращался вокруг оси c ГПУ структуры с шагом 15° в диапазоне от 0 до 180° . При каждом повороте образец отогревался выше T_N и охлаждался в поле $H = 10$ кЭ до температуры $T = 60$ К. Результаты эксперимента представлены на рисунке. Параметр γ демонстрирует знакопеременную азимутальную (с периодом $174^\circ \pm 8^\circ$) зависимость от ориентации образца в магнитном поле. Для объяснения знакопеременного характера используется гипотеза, основанная на предположении существования в образце одноосной анизотропии и не инверсной симметрии пленки.



Зависимость параметра γ от направления магнитного поля в базисной плоскости

1. Tarnavich V. V. et al // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 89. – Pp. 054406.

2. Тарнавич В. В. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2014. – № 10. – С. 19–25.

Влияние температуры и высоких давлений на кристаллическую и магнитную структуры Ba_2FeMoO_6

В. А. Турченко^{1,2}, Л. В. Ковалев³, М. В. Ярмолич³, Е. В. Лукин¹, Н. А. Каланда³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Донецк, Украина

³ ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

Интерес к исследованию двойных перовскитов с общей формулой $A_2B'B''O_6$ (где $A = La; Pr; Sr; Ba$ и т.д., а B' и $B'' = W; Co; Mn; Fe; Mo$ и т. д.) [1, 2] связан с их уникальными свойствами: высокие значения температуры

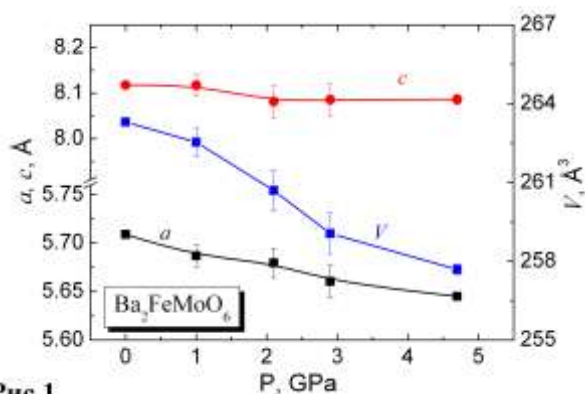


Рис. 1

Кюри и спиновой поляризации электронов проводимости, что делает перспективным применение данных материалов в устройствах спиновой электроники (спинтроники) при создании спиновых клапанов и сенсоров магнитного поля. Величина влияния спинового эффекта таких материалов сильно зависит от степени поляризации и плотности состояний на уровне Ферми, на которую, в свою

очередь, критическое влияние оказывают как валентное состояние, так и средний размер катионов B' и B'' . Поэтому, для реализации возможности их практического применения, следует изучить зависимость между кристаллической и магнитной структурой двойных перовскитов. Цель данной работы – установить влияние внешних факторов (температуры и высоких давлений) на кристаллическую и магнитную структуру Ba_2FeMoO_6 . Образцы были получены методом твердофазного синтеза при температуре 1200 °С (10 ч) в непрерывном потоке H_2/Ar .

Исследования кристаллической и магнитной структуры были выполнены методом нейтронной дифракции на Фурье дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) [3] и ДН-6 на импульсном реакторе ИБР-2 в Дубне. При понижении температуры исследуемого образца, наблюдается изменение типа кристаллической решетки. Зависимость параметров элементарной ячейки от приложенного давления приведена на рисунке, из которого следует, что с ростом внешнего давления параметры кристаллической решетки уменьшаются.

1. A. N. Habib, A. Saleem, C. V. Tomy, and D. Bahadur, J. Appl. Phys. V.97, 10A906 (2005).

2. Fiona C. Coomer and Edmund J. Cussen, Inorg. Chem. V.53, P.746, (2014).

3. A.M. Balagurov // Neutron News 2005. V. 16. № 3. P.8.

Уточнение атомной и магнитной структуры твердых растворов бариевых ферритов методом нейтронной дифракции

В. А. Турченко^{1, 2}, А. В. Труханов^{3, 4}, С. В. Труханов³, И. С. Казакевич³

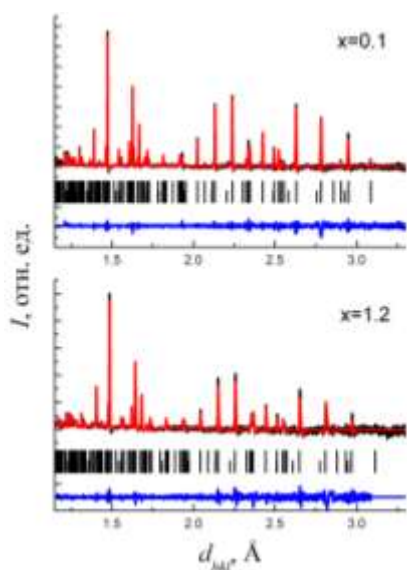
¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Донецк, Украина

³ ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

⁴ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

Гексаферриты бария [1, 2] являются ферримагнетиками, их магнитная структура хорошо описывается моделью, предложенной Гортером [3], согласно которой, все магнитные моменты атомов Fe^{3+} ориентированы вдоль оси легкого намагничивания, совпадающей с гексагональной осью Ос. Следствием их ферримагнитной структуры является невысокое значение



индукции насыщения. В настоящей работе методом дифракции нейтронов изучено влияние частичного замещения магнитоактивных ионов железа диамагнитными ионами индия на кристаллическую и магнитную структуры $\text{BaFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$ в широком интервале концентраций ($x = 0,1-1,2$). Примеры нейтронограмм, измеренные при комнатной температуре и обработанные по методу Ритвелда, приведены на рисунке. Согласно экспериментальным данным все исследованные образцы – однофазные с гексагональной элементарной ячейкой, описываемой пространственной группой $R\bar{6}_3/mmc$ (№ 194), на которую приходится две формульные единицы ($Z = 2$). С ростом концентрации ионов индия наблюдается

увеличение объема элементарной ячейки, тогда как значение температуры фазового перехода ферримагнетик–парамагнетик уменьшается.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов ОИЯИ (№04-4-1121-2015/2017) и БРФФИ (№Ф15Д-003), а также при частичном софинансировании Министерства образования и науки РФ по программе повышения конкурентоспособности НИТУ «МИСиС» среди ведущих мировых научно-образовательных центров (№ К4-2015-040).

1. Y. Tokunaga, Y. Kaneko, D. Okuyama et al. Phys. Rev. Lett. 105, 257201 (2010).

2. G. Tan, X. Chen, J. Magn. Mater. 327, 87 (2013).

3. E.W. Gorter, Proc. IEEE Suppl. 1957. V. 104 B. P. 225.

Проект эксперимента по изучению эффекта аномального пропускания нейтронов при преимущественно резонансном поглощении

А. Н. Тюлюсов^{1, 2}, Н. О. Елютин^{1, 2}, Д. В. Львов^{1, 2}

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

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

Эффект аномального пропускания нейтронов, являющийся аналогом эффекта Бормана для X-лучей, изучался ранее как теоретически [1], так и экспериментально, причем в случае сильного (кристаллы CdS) [2] и слабого поглощения (Ge) [3], (Si) [4]. Интерес представляет изучение этого эффекта вблизи резонансных уровней ядер. Впервые такие исследования были проведены в ИАЭ [2], однако не удалось достичь полного согласия с теорией.

За прошедшее время усовершенствовалась как техника эксперимента, так и методы выращивания кристаллов, что даёт возможность продолжить изучение этого эффекта. Предлагается проведение экспериментов на кристаллах CdS, используемых ранее [2], и на более совершенных кристаллах InSb. Вблизи тепловой части спектра имеется мощный резонансный уровень ядра ^{115}In при $E_n = 1,45$ эВ, при этом ниже резонанса имеются области (10–300 мэВ и 300–1000 мэВ) с одинаковыми сечениями (n,γ)-реакции, при этом в одной области преимущественно потенциальное рассеяние, а в другой существенен вклад резонансного. Это позволит в одном опыте наблюдать эффект аномального пропускания при динамической дифракции нейтронов в одной области преимущественно потенциального рассеяния, а в другой там, где существенен вклад резонансного.

Особенностью предлагаемой экспериментальной методики является одновременная регистрация как прошедшего, так отраженного пучков нейтронов, что было апробировано в [3]. При этом предполагается также и одновременная регистрация γ-частиц, образованных в результате поглощения нейтронов ядрами ^{115}In .

Представлены оценки возможных параметров экспериментов и численное моделирование результатов.

1. Ю.М. Каган, А.М. Афанасьев, ЖЭТФ **49**, 1504 (1965).

2. С.Ш. Шильшейн, В.И. Марухин, М. Каланов и др., Письма ЖЭТФ **12**, 80 (1970).

3. N.O. Elyutin, Yu.I. Smirnov, A.N. Tyulyusov, Cryst. Rep. **49(S1)**, s55 (2004).

4. Е.О. Вежлев, В.В. Воронин, И.А. Кузнецов, и др., Письма в ЖЭТФ **96**, 3 (2012).

Исследование пленок Co / MnF₂ с обменным смещением методом рефлектометрии поляризованных нейтронов

В. А. Уклеев¹, В. В. Фёдоров², С. М. Сутурин², С. В. Гастев²,
Г. А. Вальковский³, А. А. Воробьёв⁴, С. В. Григорьев^{1, 3}, Н. С. Соколов²

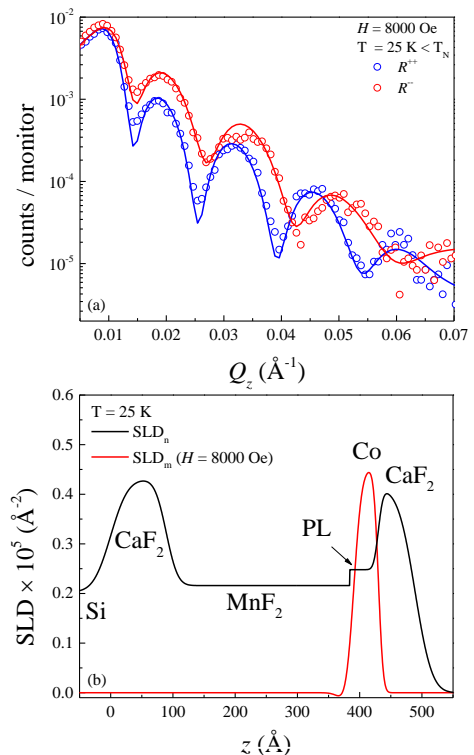
¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden

Гетероструктуры ферромагнетик / антиферромагнетик (ФМ / АФМ) представляют собой класс новых искусственных материалов, проявляющих однонаправленную магнитную анизотропию, или т. н. эффект обменного смещения петли гистерезиса ФМ. Эффект обменного смещения наблюдается при охлаждении системы ФМ / АФМ ниже температуры АФМ упорядочения (T_{Neel}) в приложенном магнитном поле. Хотя эффект был обнаружен ещё в 1956 году [1], до сих пор отсутствует единая картина взаимодействия между слоями ФМ и АФМ. В частности, нерешённым является вопрос о существовании и роли нескомпенсированных магнитных моментов в слое и на поверхности АФМ. В настоящей работе было проведено комплексное исследование гетероструктур ФМ / АФМ на основе Co / MnF₂, в которых ниже T_{Neel} MnF₂ (67 K) наблюдается отрицательное обменное смещение. Для определения тонких эффектов, связанных с запиранием магнитных моментов на интерфейсе, необходимо детально знать структурные особенности каждого слоя плёнки. Для этого было проведено измерение рентгеновской рефлектометрии с последующей аппроксимацией данных с учётом всех инструментальных параметров. На основе полученной информации о структуре плёнки была проведена качественная обработка данных рефлектометрии поляризованных нейтронов, которая показала наличие слоя нескомпенсированных магнитных моментов в слое АФМ на интерфейсе Co / MnF₂ толщиной 0,6 нм (рис.).



(a) Кривые отражения поляризованных нейтронов от образца Co / MnF₂ в поле $H = 8000$ Э. Символами изображены экспериментальные данные, теоретическая модель – сплошными линиями. (b) Профиль плотности длины рассеяния, соответствующий теоретической модели на рисунке (a)

1. Manna P.K., Yusuf S.M., Phys. Rep. Elsevier B.V., 2014. Vol. 535, № 2. P. 61–99.

Наночастицы феррита кобальта в SiO₂-матрице: синтез, структура и магнитные свойства

Т. В. Хамова¹, Г. П. Котица^{1,2}, О. А. Шилова¹, А. Е. Соколов², А. Е. Баранчиков³

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

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

³ *Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

В настоящей работе методами МУРР и МУРПН, порошковой дифракции нейтронов, СЭМ и низкотемпературной адсорбции азота было проведено исследование структурных и магнитных свойств композита, представляющего собой наночастицы CoFe₂O₄ в матрице SiO₂. Образцы получали золь-гель методом на основе золя тетраэтоксисилана (ТЭОС), гидролизованного в водно-спиртовой кислой среде в присутствии модифицирующих неорганических веществ Fe(NO₃)₃·9H₂O и Co(NO₃)₂·6H₂O. В основе приготовления кремнезоля лежала двухстадийная методика кислотного гидролиза ТЭОС. На 1-й стадии гидролиза исходные компоненты Si(OEt)₄, EtOH, H₂O и HNO₃ последовательно смешивались при мольном соотношении 1:1,6:2,5:0,001, соответственно. Полученный кремнезоль помещался в закрытый сосуд и выдерживался при 5 °С в течение суток. Приготовление кремнезоля, содержащего модифицирующие компоненты (нитраты железа и кобальта) – 2-я стадия гидролиза, осуществлялось путем добавления к кремнезолу 1-й стадии гидролиза водного раствора солей Fe(NO₃)₃·9H₂O и Co(NO₃)₂·6H₂O. В результате при комнатной температуре получался прозрачный модифицированный кремнезоль темно-бордового цвета. Концентрация модифицирующих веществ выбиралась из расчета получения материала следующего состава 23CoO·31Fe₂O₃·46SiO₂ масс. %.

Модифицированный кремнезоль старился в закрытом сосуде до перехода в гель при комнатной температуре. Полученный гель высушивался при 100 °С на воздухе до образования ксерогеля. Ксерогель подвергался термообработке при 800 °С в течение 2 часов на воздухе. В результате получался композиционный материал, представляющий собой наночастицы феррита кобальта в матрице SiO₂.

Из анализа экспериментальных сечений рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ поляризованных нейтронов получен вид магнитного коррелятора и магнитно-ядерного кросс-коррелятора, определены характерные радиусы магнитных R_m и магнитно-ядерных корреляций R_{mn} , а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки. Проведено сравнение данных МУРПН с результатами, полученными методами МУРР, порошковой дифракции нейтронов, СЭМ и низкотемпературной адсорбции азота.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «НАНОСТРУКТУРЫ: ФИЗИКА, ХИМИЯ, БИОЛОГИЯ, ОСНОВЫ ТЕХНОЛОГИЙ».

Superconductivity and Magnetism in Noncentrosymmetric RhGe

*A. V. Tsvyashchenko¹, V. A. Sidorov¹, A. E. Petrova¹, L. N. Fomicheva¹,
I. P. Zibrov¹ and V. E. Dmitrienko²*

¹ *L. F. Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Troitsk, Russia*

² *A. V. Shubnikov Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

RhGe synthesized at high pressure crystallizes in the noncentrosymmetric B20 cubic structure. Measurements of electrical resistivity and magnetization demonstrate a superconducting state below $T_c \approx 4.3$ K and weak ferromagnetism below $T_m \approx 140$ K. Specific heat data confirm the bulk nature of superconductivity in this ferromagnetic superconductor. Point contact spectra in the superconducting state exhibit the complex Andreev reflection signal which may indicate to the mixed singlet-triplet order parameter. The superconducting region forms a dome on the P-T diagram with a maximum of T_c near 4 GPa. It was also found that the superconductivity of RhGe₄ is suppressed at high pressure in contrast with RhGe. Ab initio simulations suggest that the observed weak magnetization emerges from the pronounced toroidal-like spin polarization with magnetic quadrupole and toroidal moments located at Rh and Ge sites.

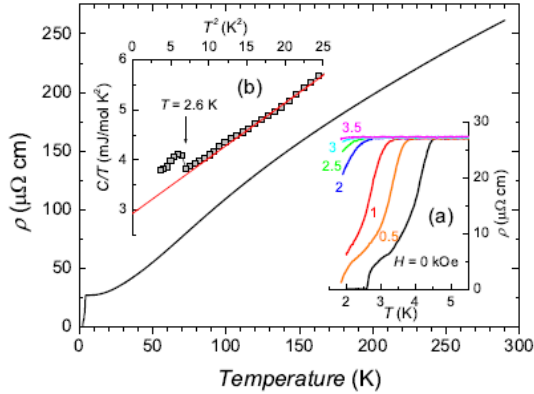


Fig. 1. Temperature dependence of the electrical resistivity of RhGe_{0.986}. Inset (a) – temperature dependences of resistivity in various magnetic fields around the superconducting transition. Inset (b) – temperature dependence of the specific heat (in the form C/T vs T^2) of RhGe around the superconducting transition

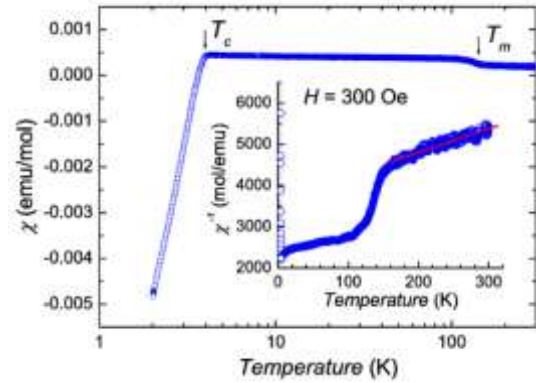


Fig. 2. Temperature dependence of the magnetic susceptibility of RhGe_{0.986}. The inset shows the temperature dependence of the inverse susceptibility. The bold red line in the inset is a linear fit of data above the magnetic transition for superconducting

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 14-02-00001), and by special programs of the Department of Physical Science, Russian Academy of Sciences.

Investigation of multilayered magnetic nanostructure Fe/Co and a new version of the neutron polarization analysis

Kyaw Zaw Lin¹, V. G. Syromyatnikov^{1, 2}

¹ *Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia*

² *B. P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, National Research Centre
“Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia*

Interest in magnetic multilayered nanostructures doesn't weaken for the last decades. In particular, it is caused by use of such structures as neutron optical elements in research neutron physical facilities [1]. In this work present the results of researches of magnetic multilayered periodic Fe/Co nanostructure by method of a polarized neutron reflectometry. Measurements are taken on the neutron reflectometer NR-4M at the WWR-M reactor (PNPI NRC “Kurchatov Institute”) by the TOF method [2]. Experimental and theoretical coefficients of reflection of a neutron beam from the multilayer magnetic Fe/Co nanostructure depending on the momentum transfer for several amount of a magnetic field and for both spin component are specified in work. It is established and confirmed with calculation that coefficients of reflection of the first order Bragg's peaks for the researched Fe/Co nanostructure for both spin component of neutron beam are almost equal each other and weakly depend on a magnetic field.

In this paper we offer application of multilayer magnetic nanostructure Fe/Co as a bipolar monochromator-polarizer for the time of flight neutron reflectometer. In the work we introduce the new version of the neutron polarizing analysis by using the researched multilayered nanostructure on the basis of Fe/Co pairs. The new version of the neutron polarizing analysis have been compared with the traditional method of the neutron polarizing analysis as well.

Определение степени энантиоморфного избытка в поликристаллических металлических образцах со структурой типа В20

Н. М. Чубова¹, В. А. Дядькин^{1, 2}, Д. Мензель³, С. В. Григорьев^{1, 4}

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

² *Swiss-Norwegian Beam Lines at European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

³ *Технический университет Брауншвейга, Брауншвейг, Германия*

⁴ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Исследована степень энантиоморфного избытка (киральности) ряда объёмных поликристаллических образцов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с концентрацией $x = 0,1; 0,15; 0,20; 0,254; 0,30$ и $0,50$. Поликристаллы были получены путём расплава исходных компонентов высокой частоты. Изучена поверхность образцов и определено количество кристаллитов в поликристаллах, которые имеют игольчатую форму и средний объём 2 мм^3 . Малоугловая дифракция поляризованных нейтронов использовалась для измерения магнитной киральности Γ как $\gamma = -\Gamma$. Установлено, что средняя киральность поликристаллов $\langle \gamma \rangle$ не зависит от концентрации и отклоняется от нуля на величину $10\text{--}20\%$ поскольку она ограничена малым количеством кристаллитов в образце. Ошибка измерений средней киральности определяется статистикой рассеяния нейтронов и не превышает величины 1% . Количество кристаллитов в образце (около 100 штук) определяет ошибку определения энантиоморфного избытка, которая составляет $\sim 10\%$.

Работа выполнена при поддержке программы РФФИ (грант № 14-22-01073_офи_м).

Особенности кристаллической и магнитной структур двойных перовскитов в широком интервале температур

*М. В. Ярмолич³, В. А. Турченко^{1, 2}, Н. А. Каланда³, С. Е. Демьянов¹,
В. Г. Симкин¹, А. М. Балагуров¹, А. Х. Исламов¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,
Донецк, Украина

³ ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь

Двойные перовскиты с общей формулой $AA'BV'O_6$ (где A и $A'=Ca, Sr, La$ и др., $B=Fe, Cr...$ и $B'=Mo, W, Re...$) представляют собой сложные системы и привлекают к себе как научный так и практический интерес благодаря таким физическим свойствам как существенное значение магнитосопротивления (MR) $\sim 38\%$ в относительно слабых магнитных полях $B = 1$ Тл при $T = 50$ К, высокие температуры Кюри ($T_c = 400\text{--}450$ К) и практически 100%-ная степень спиновой поляризации [1– 3].

В данной работе методом нейтронной дифракции высокого разрешения в интервале температур (100–470 К) исследовано поведение кристаллической структуры двойных перовскитов $Sr_{1+x}Ba_{1-x}Fe_{1+x}Mo_{1-x}O_6$ ($x = 0$ и 0,1). Расчет кристаллической структуры обоих составов проведен для двух типов: тетрагональной и ромбической решеток. В случае ромбической структуры рост концентрации ионов Sr и Fe ведет к более существенному искажению решетки в области низких температур.

Обнаружено увеличение значений магнитных моментов подрешетки железа при понижении температуры. Частичное замещение Ba и Mo ионами Sr и Fe приводит к увеличению значений T_c на 30 К, что объяснено образованием в подрешетке железа областей локального ферромагнитного упорядочения. Монотонное увеличение микродеформаций в кристаллитах образцов $Sr_{1+x}Ba_{1-x}Fe_{1+x}Mo_{1-x}O_6$ ($x = 0$ и 0,1) при понижении температуры обосновывается влиянием магнострикционных эффектов.

1. D. Serrate, J.M. De Teresa, M.R. Ibarra, J. Phys.: Condens. Matter 19, 1 (2007).

2. L.V. Kovalev, M.V. Yarmolich, N.A. Kalanda et al., ACS Appl. Mater. Interfaces. 6(21), 19201 (2014).

3. N. Kalanda, S. Demyanov, W.Masselink et al., Cryst. Res. Technol. 46, 463 (2011).

Исследование фазовых переходов в цирконате-титанате свинца с концентрацией титана до 6 % методами рассеяния синхротронного излучения

*Д. Андроникова^{1,2}, А. Барон³, А. Босак⁴, Р. Бурковский¹, С. Б. Вахрушев²,
Н. Г. Леонтьев⁵, И. Н. Леонтьев⁶, А. В. Филимонов¹, Д. Чернышев⁴*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ RIKEN SPring-8 Center, Киото, Япония

⁴ European Synchrotron, Grenoble, France

⁵ Азово-Черноморский инженерный институт, Донской государственный аграрный университет, Зерноград, Россия

⁶ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Цирконат-титанат свинца (ЦТС), представляющий собой твердый раствор модельного антисегнетоэлектрика цирконата свинца и сегнетоэлектрика титаната свинца, – сегнетоэлектрический материал, нашедший распространение в различных областях электротехники. В высокотемпературной несегнетоэлектрической фазе цирконат свинца имеет структуру кубического перовскита, при комнатной температуре является антисегнетоэлектриком с орторомбической симметрией. Сообщалось [1–4] о существовании промежуточной фазы между антисегнетоэлектрической и параэлектрической фазами. При допировании цирконата свинца титаном область существования данной фазы расширяется. Переход из пара-электрической фазы в промежуточную фазу сопровождается возникновением сверхструктурных рефлексов М-типа ($\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$), что указывает на то, что перестройка структуры при фазовом переходе происходит с изменением трансляционной симметрии. Методом электронной дифракции было обнаружено, что в окрестности М-рефлекса существуют дополнительные пики, видимые как расщепление М-рефлекса [5]. В работах [6, 7] предполагается, что наблюдаемые расщепления вызваны наличием антифазных границ в сетке смещений свинца. С целью уточнения структурных деталей промежуточной фазы и установления особенностей динамики решетки в ЦТС, нами было проведено исследование группы монокристаллов ЦТС с концентрацией титана от 0,7 % до 6 % методами рассеяния синхротронного излучения.

1. Michiyoshi Tanaka, Ryuichi Saito, and Kaoru Tsuzuki. Electron microscopic studies on domain structure of pbzro3. Japanese Journal of Applied Physics, 21(2R):291, 1982.

2. H. Fujishita and S. Hoshino. A study of structural phase transitions in antiferroelectric pbzro3 by neutron diffraction. J. Phys. Soc. Jpn., 1984.

3. J Dec and J Kwapulinski. Crystallogometry of phase transitions in pbzro, single crystals. J. Phys.: Condens. Matter, 1:3389–3396., 1989.

4. Zhengkui Xu, Xunhu Dai, Dwight Viehland, David A. Payne, Zhuang Li, and Yendao Jiang. Ferroelectric domains and incommensuration in the intermediate phase region of lead zirconate. Journal of the American Ceramic Society, 78(8):2220–2224, 1995.

5. Viehland, D. Transmission electron microscopy study of high-Zr-content lead zirconate titanate, PRB.-52. 2. 1995.
 6. S. Watanabe et al. Features of the incommensurate phase in $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$, PRB.-2002.- 66.-pp.134102.
 7. Ricote, J. et al. A tem and neutron diffraction study of the local structure in the rhombohedral phase of lead zirconate titanate, Journal of Physics: Condensed Matter.- 1998.-10(8).-pp.1767.

Исследование структурно-функциональных комплексов хроматина

*М. И. Арефьев¹, Н. А. Григорьева¹, Н. В. Михайлов¹,
 А. М. Поляничко¹, А. В. Рогачев², A. Round³*

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

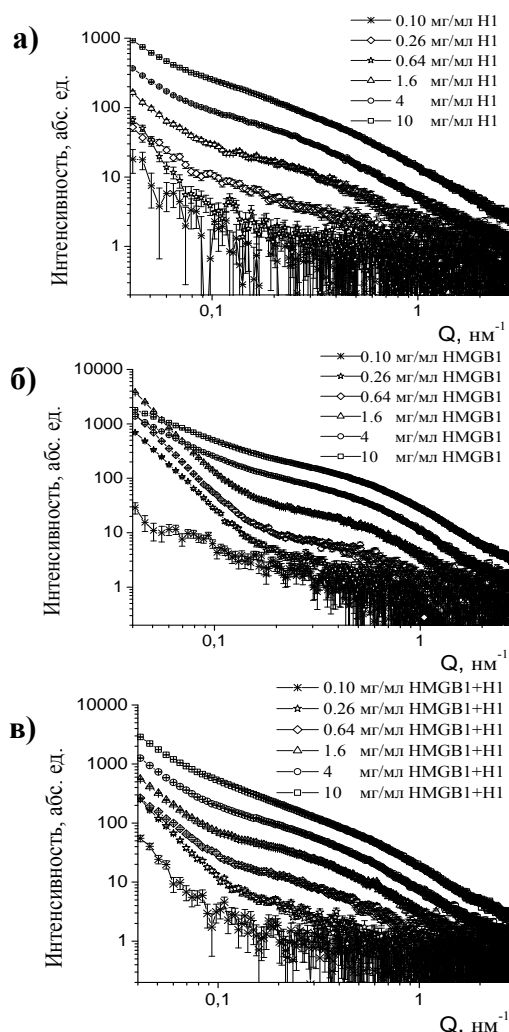
² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ European Molecular Biology Laboratory, EMBL Grenoble Outstation

Хроматин представляет собой достаточно сложную совокупность ДНК, большого числа белков и разнообразных низкомолекулярных лигандов, функционирующих в клеточном ядре. В качестве функциональных элементов хроматина, как правило, выступают специализированные ДНК-белковые и белок-белковые комплексы, состоящие из десятков отдельных молекул. Наиболее распространёнными архитектурными белками хроматина являются белки семейства HMGB и линкерный гистон H1. Мишенью связывания для обоих белков служит линкерный участок ДНК, однако до сих пор остаётся малоизученным вопрос о взаимодействии этих белков между собой [1]. Исследование растворов HMGB1 и гистона H1 при физиологических условиях проводилось методом малоуглового рассеяния синхротронного излучения (SAXS). Для каждого из исследованных белков была получена серия кривых при разной концентрации. Результаты анализа этих кривых указывает на наличие существенной агрегации исследуемых белков даже при незначительной концентрации.

В результате анализа кривых малоуглового рассеяния были получены значения радиусов гирации белков и фрактальные размерности их агрегатов. Полученные данные будут использованы в моделировании комплекса HMGB1 / H1 белков методом молекулярной динамики, чтобы достоверно ответить на вопрос возможно ли существование таких комплексов.

1. Zlatanova, J. and K. van Holde, Bioessays, 1998. 20(7): p. 58.



Зависимость интенсивности синхротронного рассеяния от величины переданного импульса для растворов: а) линкерного гистона H1, б) белка HMGB1, в) смеси HMGB1 и H1 в соотношении 1:1 различной концентрации

Анизотропия диффузного рассеяния в монокристаллах PZT54

Ю. А. Бронвальд^{1, 2}, Д. А. Андроникова^{1, 2}, Р. Г. Бурковский¹,
С. Б. Вахрушев^{1, 2}, Д. Ю. Чернышов³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ The Swiss-Norwegian Beamlines at ESRF, Grenoble, France

Широко известно, что диффузное рассеяние (ДР) в твердых растворах сегнетоэлектрика цирконата-титаната свинца (ЦТС) сильно видоизменяется с увеличением в нем концентрации титаната свинца. При этом ДР в чистом цирконате свинца [1] значительно отличается от ДР в чистом титанате свинца [2].

В тоже время, характеристики ДР в свинцовосодержащих сегнетоэлектриках-релаксорах допированных PbTiO_3 , таких, как твердые растворы PMN-PT и PZN-PT, сильно меняется при переходе через так называемую морфотропную фазовую границу (МФГ) [3]. МФГ называют практически вертикальную фазовую границу на фазовой диаграмме концентрация – температура. В связи с чем встает вопрос как будет вести себя ДР и, следовательно, термодинамический потенциал в ЦТС при пересечении имеющейся в нем МФГ, разделяющей ромбоэдрическую и тетрагональную фазы. В одной из наших предыдущих работ сообщалось, что ДР в кристаллах $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ с $x = 0,47$ резко отличается как от ДР в чистом PbZrO_3 , так и от ДР в чистом PbTiO_3 [4]. Вследствие этого представляет интерес детально исследовать ДР в области смежной к МФГ, соответствующей тетрагональной структуре ЦТС в низкотемпературной фазе. В рамках данной работы нами было проведено исследование ДР в кристаллах $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ с $x = 0,54$ высокотемпературной фазе с использованием метода квазиупругого рассеяния рентгеновского излучения. Эксперимент проводился на базе оборудования швейцарско-норвежских линий синхротронного источника ESRF. Сравнение карт диффузного рассеяния в кристаллах PbZrO_3 , $\text{PbZr}_{53}\text{Ti}_{47}\text{O}_3$ и $\text{PbZr}_{46}\text{Ti}_{54}\text{O}_3$ показывает, что увеличение в ЦТС концентрации PbTiO_3 в целом значительно уменьшает анизотропию распределения рассеяния, однако отдельные особенности ДР, не наблюдаемые в чистом PbTiO_3 , все еще остаются.

1. A.K. Tagantsev, K. Vaideeswaran, S.B. Vakhrushev et al., Nat. Commun. 4, 2229 (2013).

2. B.D. Chapman, E.A. Stern et al., Phys. Rev. B 71, 020102 (2005).

3. M. Matsuura, K. Hirota, P.M. Gehring, Z.-G. Ye, W. Chen, and G. Shirane, Phys. Rev. B 74, 144107 (2006).

4. R.G. Burkovsky, Y.A. Bronwald, A.V. Filimonov, A.I. Rudskoy, D. Chernyshov, A. Bosak, J. Hlinka, X. Long, Z.-G. Ye, S. Vakhrushev, Phys. Rev. Lett. 109, 097603 (2012).

EXAFS, XANES и XRD исследования наноструктур легированного медью ZnS, термически осажденных в матрицы пористого оксида алюминия

*Р. Г. Валеев, А. Л. Тригуб, А. Н. Бельтюков, А. И. Чукавин,
И. А. Елькин, Т. С. Картапова*

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

В настоящее время развитие науки и технологии преимущественно идет в направлении уменьшения размеров различных устройств с одновременным улучшением их функциональных характеристик. Актуальной является задача повышения разрешающей способности устройств отображения информации, повышения яркости изображения, увеличения скорости включения источника света с одновременным уменьшением энергопотребления и стоимости их производства. В связи с этим разрабатываются и исследуются новые материалы, в частности, на основе легированного ионами различных химических элементов ZnS, которые могут быть использованы в излучающих структурах источников света [1].

Целью настоящей работы является проведение исследований структурно-фазового состояния, локальной атомной и электронной структуры наночастиц сульфида цинка, легированного медью с концентрацией 5 ат. %, осажденных в матрицы пористого Al_2O_3 с диаметром пор 80 нм и толщиной 1, 3 и 5 мкм методом термического напыления. Для сравнения использовались пленки материалов, синтезированные вместе с наноструктурами.

Рентгенофазовый анализ образцов показал наличие соединений меди и цинка с серой (Cu_2S и ZnS , соответственно) причем последний находится в кубической (сфалерит) и гексагональной (вюрцит) модификациях.

Методом EXAFS и XANES-спектроскопии показано, что в образцах, напыленных на поликор и оксид алюминия толщиной 3 и 5 мкм, большая часть атомов меди находится в соединении Cu_2S , тогда как в образце, напыленном на слой оксида алюминия толщиной 1 мкм, атомы меди входят в состав металлических частиц меди. По спектрам XANES на К-крае цинка по сдвигу пиков можно сделать вывод, что расстояние Zn-S для образца с толщиной слоя пористого Al_2O_3 1 мкм слегка укорочено по сравнению с другими образцами. Упомянутый результат хорошо согласуется с данными EXAFS спектроскопии.

Работа выполнялась в рамках проекта РНФ (грант 15-19-10002).

1. X. Fang, T. Zhai et al., Progress in Materials Science 56, 175 (2011).

Смещение атомов в кристаллической решетке MnGe под воздействием температуры и давления

Г. А. Вальковский¹, Е. Г. Яшина¹, А. В. Цвященко³, 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

³ Институт физики высоких давлений, Троицк, Москва, Россия

Магнитные и электронные свойства моносилицидов и моногерманидов металлов Mn, Fe, Co со структурой типа B20 довольно необычны и проявляют аномальные зависимости от температуры и давления. Удивительно также и то, что, несмотря на незначительную разницу параметров решётки этих соединений, эти свойства значительно варьируются.

Кристаллическая решётка моносилицидов и моногерманидов переходных металлов характеризуется кубической, но довольно низкосимметричной пространственной группой $R2(1)3$. Отсутствие центра инверсии при наличии спин-орбитального взаимодействия в переходных металлах допускает возникновение взаимодействия Дзялошинского-Мория. Воздействие на кристаллическую решётку и её деформация может индуцировать гигантскую анизотропию этого взаимодействия [1]. Исследование эволюции кристаллической решётки при различных внешних воздействиях может дать информацию о причине необычного поведения физических свойств.

Эволюция параметра решётки как функция температуры и давления исследовалась в работах [2, 3]. В [2] обсуждалось необычное тепловое расширение MnGe, не описываемое в рамках квазигармонической модели Дебая-Грюнайсена. В качестве одного из возможных объяснений выдвигалась гипотеза о плавном переходе из состояния с низким спином LS в состояние с высоким спином HS. В [3] исследовалось уравнение состояния MnGe и наблюдался обширный гистерезис по давлению, появление которого было связано с деформациями кристаллической решётки, сопровождающиеся магнитообъёмным эффектом, что в свою очередь приводило к изменению спинового состояния.

Для более детального описания термодинамических аномалий целесообразно провести исследование эволюции координат атомов и длин связей MnGe в зависимости от температуры и давления, что и было сделано в данной работе. Показана анизотропия изменения длин связей, необычное поведение тепловых смещений.

1. T. Koresune, et al., (2015), Scientific reports, DOI 10.1038/srep13302

2. G. Valkovskiy, et al., (2015), arXiv:1508.04701.

3. M. Martin, I.Mirebeau et al., (2016), arXiv:1601.05332.

Картирование текста древнего пергамента методом рентгенофлуоресцентного элементного анализа на синхротронном источнике

П. В. Гурьева, А. А. Демкив

*Отдел синхротронно-нейтронных и рентгеновских исследований
НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Большой исторический интерес вызывает возможность чтения древних рукописей, подвергшихся стиранию или переписыванию, однако поскольку чернила проникают в пергамент глубоко и в своем составе содержат такие элементы как: железо, ртуть, свинец, то это позволяет использовать синхротронное излучение, которое вызывает флуоресценцию этих элементов и тем самым позволяет читать скрытый, стертый текст. Поскольку энергия синхротронного излучения велика, то это позволяет регистрировать даже небольшие концентрации элементов.

На основании работы проведенной в Стэнфордской лаборатории синхротронного излучения [1], нами совместно с Институтом археологии РАН и Государственным историческим музеем проводится исследование пергаментов с целью чтения скрытых и стертых текстов. Был получен фрагмент пергамента с двумя типами чернил: железо-галловые и киноварь. Железо-галловые чернила представляют собой смесь галлов, паразитные наросты на деревьях и железного купороса разбавленную различными жидкостями или кислотами. Киноварь они же императорские чернила это минеральные чернила красного цвета, содержащие ртуть. В ходе эксперимента на станции рентгенофлуоресцентного анализа [2], Курчатовского источника синхротронного излучения [3] была отсканирована буква красного цвета и получено ее рентгеновское изображение.

1. Placed under X-ray gaze, Archimedes manuscript yields secrets lost to time _ Stanford Report, May 19, 2005.

2. A.N. Artemiev, N. Artemiev, A. Dyatlov, B. Kirillov, V. Kvardakov, A. Maevskiy, O. Nayda and A. Zabelin, "Station for investigation with high spatial resolution on Kurchatov SR source", Nuclear Instruments & Meth. A 575(2007) 228-230.

3. <http://www.nrcki.ru/>

Поиск и локализация микровключений Pd в образцах хромитового горизонта платиноносного комплекса Бушвельд

*Ф. А. Дарьин^{1, 2}, Д. С. Сороколетов^{1, 2}, Я. В. Ракиун^{1, 2},
А. В. Дарьин³, И. В. Векслер⁴*

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

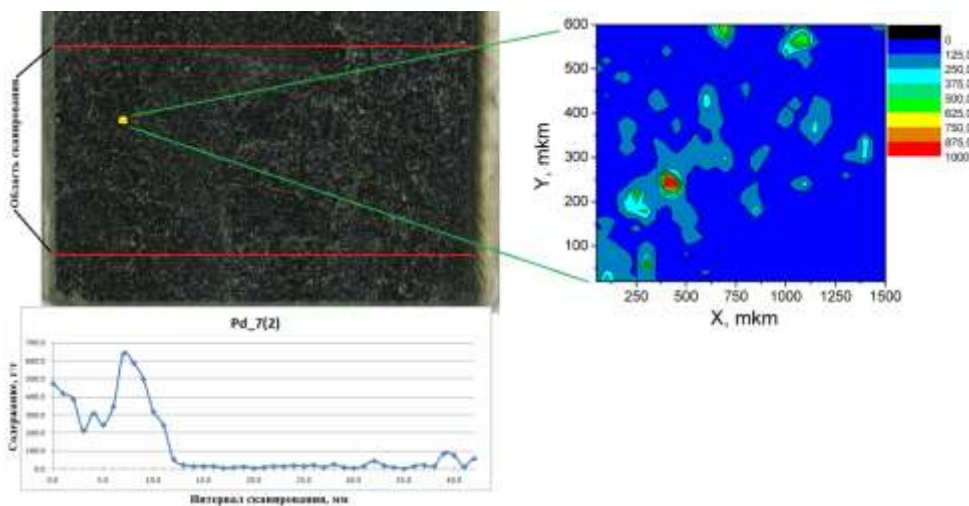
² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия.

³ Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

⁴ Технический университет Берлина, Отделение минералогии, Берлин, Германия

На экспериментальной станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3 ЦКП «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения» на базе ИЯФ СО РАН выполнена работа по поиску и исследованию микровключений. Поиск выполнялся с использованием методики сканирующего рентгенофлуоресцентного анализа [1, 2] и конфокальной рентгеновской микроскопии [3].

Образец 7(2) для исследования микроэлементного состава из хромитового горизонта UG1 платиноносного комплекса Бушвельд (Южная Африка) был приготовлен в виде плоскопараллельной шлифованной пластинки толщиной 2 мм, длиной 42 мм и шириной 25 мм. Ранее проведенное сканирование образца с шагом 1 мм, сделанное широким пучком $1 \times 20 \text{ мм}^2$ с энергией возбуждения 30 кэВ, показало наличие интервала с повышенными содержаниями палладия (рис. слева).



Распределение Pd вдоль профиля одномерного сканирования образца 7(2) (слева) и результаты двумерного сканирования выделенного участка (справа)

Для оценки возможности определения форм нахождения палладия в данном интервале образца был выделен участок размерами $0,6 \times 1,5 \text{ мм}^2$ в области максимального сигнала флуоресценции палладия. Пучком возбуждающего излучения с энергией 25 кэВ и размерами пятна $15 \times 30 \text{ мкм}^2$ проведено двумерное сканирование. На рисунке представлено распределение активности аналитического пика палладия на исследуемой площади. Видно присутствие отдельной частицы с размерами порядка $50 \times 100 \text{ мкм}$.

Работа выполнена на оборудовании центра коллективного пользования «Сибирский Центр Синхротронного и Терагерцового Излучения» и поддержана грантами РФФИ № 14-02-00631, №16-32-00705.

1. Дарьин А.В., Ракшун Я.В, Научный вестник НГТУ, 2(51), 2013, стр. 112-118.
2. А.В. Дарьин, И.В. Векслер, Я.В. Ракшун Поверхность, 2016 г №1, стр. 60-64.
3. Д.С. Сороколетов, Я.В. Ракшун, Ф.А. Дарьин, Автометрия 2015 № 3, стр. 94-103.

Функция разрешения дифрактометра с двумерным детектором на источнике синхротронного излучения

О. А. Звягинцев, Г. А. Вальковский

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Новые двумерные детекторы на основе пиксельных матриц (типа Pilatus), помимо применений для исследования биологических объектов, оказались удачными и для решения задач материаловедения, в частности, для порошковой дифракции синхротронного излучения [1]. Однако, полный анализ функции разрешения дифрактометров с этими детекторами до сих пор отсутствует в литературе.

В работе представлен анализ экспериментальных порошковых дифрактограмм стандарта LaB_6 , полученных при различных положениях двумерного детектора. В результате исследования ширин брэгговских линий получены функции разрешения для различных геометрий эксперимента. Проведено сравнение экспериментальной функции разрешения с описанными в литературе [2, 3], а также с теоретически рассчитанной в рамках данной работы. Вывод выражения для функции разрешения основывался на предположении, что она определяется, главным образом, размером капилляра, размером пикселя и расстоянием образец-детектор. Однако существуют и другие вклады, влияющие на разрешение детектора. К ним относится, например, толщина чувствительного кремниевого слоя детектора. Кроме того, в отличие от предыдущих работ [см., например, 2], в данной работе при расчете функции разрешения учтен вклад расходимости пучка.

В результате, рассчитанная функция разрешения хорошо согласуется с экспериментальной. Планируется дальнейшее исследование функции разрешения с целью выработки полезных рекомендаций по оптимальному использованию двумерных детекторов в порошковой моде.

1. P. Kraft, (2010) PILATUS 2M A Detector for Small Angle X-ray Scattering, PhD thesis, Zurich, 79 p.
2. P. Norby, (1997) Synchrotron Powder Diffraction using Imaging Plates: Crystal Structure Determination and Rietveld Refinement. J App Cryst. 30, 21-30.
3. Hinrichsen, Dinnebier and Jansen (2008), Powder Diffraction Theory and Practice Chapter 14 Two-dimensional Diffraction Using Area Detectors, 582 p.

Изменения атомной структуры нанокатализатора платины для окисления монооксида углерода по данным EXAFS-спектроскопии

Н. А. Колпачева¹, Л. А. Авакян¹, Л. А. Бугаев¹, J. A. van Bokhoven²

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

² ETH Zurich, Zurich, Switzerland

Задача очистки газов от монооксида углерода очень актуальна – помимо важности защиты живых организмов, также возникла необходимость защиты элементов водородных двигателей будущего. Классическим катализатором такого окисления является платина, в том числе наночастицы платины. В данной работе изучается катализатор для проведения окисления СО в восстановительной атмосфере, соответствующей режиму работы водородного двигателя. Катализатор был изготовлен в ETH Zurich путем осаждения платины на нанокристаллический оксид церия, с последующей щелочной обработкой. Экспериментальные спектры поглощения вблизи L₃-края Pt получены для двух типов наночастиц различной дисперсности [1], которая достигается в результате длительной щелочной обработки.

XAFS является мощным инструментом для анализа локальной атомной структуры атомов, поглощающих рентгеновское излучение. Однако, существует проблема, связанная с применением EXAFS к задачам катализа – то, что поглощающими являются все атомы платины, а не только каталитически активные атомы. Осаждение молекул может происходить на разные позиции, с разным числом соседей [2]. Сигнал EXAFS усреднен по всем атомам платины, что затрудняет его интерпретацию и выделение информации о каталитически активных участках. Снятие такого «усреднения» по всем атомам возможно в случае, если известна дополнительная информация, в том числе форма и размер наночастиц.

Поскольку край поглощения имеет резкий взлет, характерный для оксида, а не для металла, то в качестве стартового приближения для структурного анализа использовались кристаллические модификации платиновых оксидов: альфа и бета PtO₂, PtO, Pt₃O₄. Также были рассмотрены модели с учетом цериевой подложки, в которых одиночные атомы платины были внедрены в решетку оксида церия, либо находились на его поверхности.

Наилучшее описание спектра образца до щелочной обработки достигается при использовании двухвалентного оксида платины (PtO), а после щелочной обработки – ожидается достижение наиболее точного описания с помощью модели, в которой атомы платины были внедрены в решетку оксида церия. Эта модель наиболее ожидаемая, так как данные EXAFS показывают, что выщелачивание привело к увеличению соотношения Pt-Ce взаимодействий.

1. Singh, J. and van Bokhoven, J. A. // Catalysis Today, Recent Developments in Operando Spectroscopy. 155(3–4), p. 199 (2010).

2. Peterson, A. A., Grabow, L. C., Brennan, T. P., Shong, B., Ooi, C., Wu, D. M., Li, C. W., Kushwaha, A., Medford, A. J., Mbuga, F., Li, L., and Nørskov, J. K., Top.Catal. 55(19–20), p. 1276 (2012).

**Исследование ближайшего атомного окружения
металлических центров белка посредством EXAFS-спектроскопии
на модельных Zn-содержащих комплексах**

*В. А. Лазаренко, В. Г. Власенко, Г. С. Качалова,
А. Л. Тригуб, Е. В. Храмов, С. Н. Якунин*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Многие белки содержат ионы металлов, которые выполняют широкий спектр функций, от поддержания трехмерной структуры, до переноса электронов и участия в процессе ферментативной активности белка. Точные знания о ближайшем атомном окружении металлический ионов в белке дает возможность для более глубокого понимания его работы. Пространственная структура белка, полученная методом монокристаллической рентгеновской дифракции, обладает недостаточной точностью для данной задачи, именно поэтому для уточнения знания об окружении ионов металлов используется метод EXAFS-спектроскопии [1].

Однако низкое содержание атомов металла в белке и соответственно не высокое качество спектров поглощения рентгеновских лучей является серьезной проблемой данного подхода. Поэтому изучение металлосодержащих комплексов, строение координационного центра и спектральные характеристики которых схожи с металлическим центром исследуемого белка [2], является интересным направлением исследований.

В данной работе исследовались металлические центры белка Parkin E3 лигазы содержащие ионы цинка, спектры от которых были сравнены со спектрами от модельных соединений.

1. G. Ulrich Nienhaus, Protein-ligand interactions, 2005.
2. В.Г. Власенко, А.И. Ураев, Поверхность, 2004, №10, с. 14-19.

Формирование модулированной структуры в цирконате-титанате свинца в области содержания титаната свинца 6 %

*А. А. Леонтьев¹, Ю. А. Бронвальд^{1, 2}, Д. А. Андроникова^{1, 2},
Р. Г. Бурковский^{1, 2}, С. Б. Вахрушев^{2, 1}, Д. Ю. Чернышов³*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ European Synchrotron Radiation Facility, SNBL, Grenoble, France

Объектом исследования являлся монокристалл цирконата-титаната свинца с содержанием титаната свинца 6 %. Серия дифракционных снимков для изучаемого образца была получена на оборудовании SNBL в европейском центре синхротронных исследований. Измерения проводились в режиме охлаждения от $T = 250$ °C до $T = 30$ °C.

Переход из кубической параэлектрической фазы в полярную сопровождается появлением сверхструктурных рефлексов М-типа с координатами $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$. Дифракционные измерения подтверждают наличие модуляции в М-точке, причем эта модуляция представлена в виде расщепления центрального пика на 8 дополнительных сателлитов, расположенных, относительно центрального, в направлениях $[111]$. Возникновение сателлитов можно соотнести с существованием специфических модулированных нанодоменных структур с антипараллельными стенками в сетке антифазных смещений свинца [1]. При дальнейшем охлаждении интенсивность сателлитов резко падает и происходит еще один фазовый переход, сопровождающийся появлением на дифракционной картине Σ -сверхструктуры и несоразмерной сверхструктуры. При этом в восстановленном объеме обратного пространства кристалла присутствует одно выделенное направление $[011]$, лежащее в плоскости $[0KL]$. Оно характеризуется уширением Σ -точки и присутствием несоразмерных сверхструктурных отражений с координатами $(h+0.15 k+0.15 0)$.

Для установления типа симметрии кристалла было предложено представление экспериментальных результатов в виде двумерных карт интенсивности рассеяния, построенных в координатах ω и 2θ . На таких картах узлы типа $[\pm h \pm h \pm h]$ в орторомбической сингонии не претерпевают расщеплений, т. е. соответствуют одному и тому же 2θ при любой доменной конфигурации. Одновременно с этим, если кристалл имеет ромбоэдрическую симметрию, на дифракционных снимках не должны наблюдаться расщепления узлов по 2θ типа $[\pm h 0 0]$ вне зависимости от сформировавшейся доменной конфигурации. Так как мы экспериментально наблюдаем расщепления как узла $[-2 2 2]$, так и $[0 0 4]$, можно заключить, что симметрия кристалла не является чисто ромбоэдрической или орторомбической. Таким образом, симметрия кристалла может быть как моноклинной, так и соответствовать случаю сосуществованию фаз.

1. Dwight Viehland et. al. Structural and Property Studies of high Zr-Content Lead Zirconate Titanate, J. Ph.vs. Chem Solids Vol. 57, No. 10, pp. 1545-1554. 1996.

Суперпротонный фазовый переход в $\text{Cs}_3(\text{HSO}_4)_2(\text{H}_2\text{PO}_4)$ и $\text{Cs}_4(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$: дифракция синхротронного излучения

А. С. Михейкин

Швейцарско-норвежские линии, ESRF, Гренобль, Франция
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Широкий класс материалов с общей формулой $\text{M}_m\text{H}_n(\text{XO}_4)_{(m+n)/2}$ ($\text{M}=\text{K}$, Rb , Cs , NH_4 ; $\text{X}=\text{S}$, P , Se , As , а также соответствующие дейтерированные аналоги) проявляет аномально высокую протонную проводимость выше критической температуры перехода. Скачок проводимости достигает 4–5 порядков по сравнению с низкотемпературными фазами. Эти материалы, называемые суперпротониками, могут быть использованы в качестве твердого электролита в водородных топливных элементах [1–2].

Для двух новых представителей семейства $\text{M}_m\text{H}_n(\text{XO}_4)_{(m+n)/2}$ суперпротоников, $\text{Cs}_3(\text{HSO}_4)_2(\text{H}_2\text{PO}_4)$ и $\text{Cs}_4(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$, структурный фазовый переход в проводящую фазу был исследован с помощью *in situ* дифракции синхротронного излучения в температурном диапазоне 340–440 К. Для обоих составов наблюдается фазовый переход первого рода при 408–414 К и 412–414 К соответственно: моноклинная фаза с симметрией $\text{C}2/c$ трансформируется в смесь кубической Pm-3m и тетрагональной $\text{I}4_1/amd$ суперпротонных фаз. Соотношение между кубической и тетрагональной фазами зависит от состава и температуры. Так при дальнейшем нагреве тетрагональная модификация обратимо превращается в кубическую. Температурный интервал стабильности тетрагональной фазы зависит от числа HSO_4^- на формульную единицу. Это наблюдение иллюстрирует эффект внутреннего химического давления, т. е. разницы в термодинамическом радиусе комплексных ионов, на структуру вещества.

1. Makarova I.P., Physics of the Solid State 57, 442 (2014).
2. T. Norby, Nature 410, 877 (2011).

Преимущество спектроскопии Мёссбауэра с источником синхротронного излучения перед классической мёссбауэровской спектроскопией

Е. Д. Мухина^{1, 2}, И. И. Купенко³, А. Ю. Колесников², Л. С. Дубровинский⁴

¹ KTH Royal Institute of Technology, Стокгольм, Швеция

² Российский государственный университет нефти и газа им. И. М. Губкина, Москва, Россия

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁴ Bayerisches Geoinstitut, University of Bayreuth, Bayreuth, Germany

Одно из основных направлений применения метода ядерного гамма-резонанса (Мёссбауэровская спектроскопия-МС) – отслеживание изменений электронных свойств атома железа (^{57}Fe) в зависимости от его окружения в исследуемой системе.

В рамках исследований превращений перовскитоподобных силикатов в присутствии углеводородов в модельных условиях внутренних слоёв Земли, был проведен ряд экспериментов с использованием в качестве аналитического метода двух типов МС – с синхротронным мёссбауэровским источником – СМИ (ESRF ID18, Гренобль, Франция) [1] и классической лабораторной МС с точечным

источником ^{57}Co (BGI, Байройт, Германия) [2].

$\text{Mg}_{0,91}\text{Fe}_{0,09}\text{Si}_{0,91}\text{Al}_{0,09}\text{O}_3$ и парафин исследовались при давлении 0,8 ГПа и температуре 1000 К. Время нагрева 5 минут. Для создания давления и температуры использовалась ячейка с алмазными наковальнями и лазерный нагрев.

Оба метода показали идентичный состав железосодержащих продуктов: дублет – остаток $\text{Mg}_{0,91}\text{Fe}_{0,09}\text{Si}_{0,91}\text{Al}_{0,09}\text{O}_3$, секстет – $\alpha\text{-Fe}$, синглет – сплав с неизвестными пропорциями металлов.

Мёссбауэровские спектры продуктов эксперимента, снятые при комнатной температуре и давлении 0,8 ГПа. а – СМИ, б – МС с обычным источником. Красная линия – расчётная, линия вычитания – над графиком. Указаны время накопления спектра и относительная абсорбция (%)

Главное преимущество использования СМИ перед обычной МС – более высокий уровень относительной абсорбции, отражающий интенсивность сигнала поглощения, при значительно меньшем времени съёмки спектра и размера анализируемой зоны, – несмотря на визуально низкий уровень шума в спектре (рис. б), спектр (рис. а) СМИ более чётко отражает реальную картину соотношения компонентов.

Таким образом можно заключить, что спектроскопия Мёссбауэра с использованием источника СИ быстрее и эффективнее классической МС, в частности для образцов с небольшим количеством железа в составе, а также образцов небольшого размера, которые позволяет снимать синхротронный пучок диаметром ~ 15 мкм.

1. V. Potapkin, et al., J. Synchrotr. Radiat. 19, 559-569 (2012).

2. I.Yu. Kantor, C.A. McCammon, L.S. Dubrovinsky, J. of Alloys and Compounds 376, 5–8 (2004).

XMCD study Local Magnetism in Noncentrosymmetric Mn(1-x)Rh(x)Ge

*D. A. Salamatin¹, A. V. Tsvyashchenko¹, V. A. Sidorov¹, A. E. Petrova¹,
L. N. Fomicheva¹, A. V. Nikolaev² and A. Rogalev³*

¹ *L. F. Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Troitsk, Moscow, Russia*

² *Russia Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

³ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

All measurements of XANES and XMCD have been carried out in helium cryostat in strong magnetic field applied along the direction of the incident beam (at the temperature 10 K and the magnetic field 2 T for and 9 T for samples with $x = 0.5$ and 0.75 , and at 2 K and 9 T for the sample with $x = 0.99$). Measured XANES and XMCD spectra (without the self-absorption correction) at the L_3 -edge of Rh and K-edge of Ge are given in figures 1, 2, correspondingly.



Fig. 1 shows the XANES and XMCD spectra for the L_3 -edge of Rh taken for all three samples. We were not able to obtain spectra at the L_2 -edge of Rh due to strong diffraction effects at these energies (~ 3.16 KeV). Because of this, we could not determine the value of the induced magnetic moment of Rh caused by the magnetization in the presence of magnetic sites of Mn. However, the observed polarization at the L_3 -edge of Rh demonstrates a certain relation with the value of magnetization for the $x = 0.5$ and $x = 0.75$ samples. For $Mn_{0.01}Rh_{0.99}Ge$ the polarization at the L_3 -edge of Rh is practically absent. XMCD spectra for the K-edge of Ge with first negative peak (see Fig. 2) indicate that in the $x = 0.5$ and 0.75 samples there is a significant polarization of 4p electrons, which depends on the total magnetization. The same sign of the XMCD K-edge signal for Mn and Ge implies that moments of 4p electrons are possibly co-align. In $Mn_{0.01}Rh_{0.99}Ge$ with the magnetization close to zero, a weak polarization is nevertheless also observed.

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Gran No. 14-02-00001), and by special programs of the Department of Physical Science, Russian Academy of Sciences.

Исследование микроструктуры низкотемпературных сверхпроводящих материалов на основе Nb с использованием синхротронного излучения

*Р. Д. Светогоров¹, Я. В. Зубавичус¹, А. И. Рязанов^{1, 2}, Е. В. Семенов¹,
Rene Flukiger^{2, 3}, Luka Bottura³*

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

² *Университет Женевы, Женева, Швейцария*

³ *CERN, Geneva, Switzerland*

Синхротронное излучение предлагает широкие возможности для исследования структурных особенностей различных конструкционных материалов. Одной из актуальных в последнее время задач является изучение микроструктурных изменений, происходящих в низкотемпературных сверхпроводниках под воздействием облучения высокоэнергетичными частицами. Материалы на основе Nb (NbTi и Nb₃Sn) сейчас широко используются для создания магнитных катушек, предназначенных для генерации сильных и сверхсильных магнитных полей в различных мегаустановках. В частности, проект модернизации Большого адронного коллайдера (LHC, Швейцария) предусматривает замену сверхпроводящего материала магнитных систем на Nb₃Sn, что вызывает необходимость изучить изменение его свойств при облучении пучками частиц (протонов).

Из литературы известно [1], что изменение сверхпроводящих свойств Nb₃Sn под воздействием облучения связано, прежде всего, с изменением его структуры и, в частности, с появлением большого количества т. н. антиузельных дефектов, при которых часть атомов ниобия переходит на позиции олова в кристаллической решетке и наоборот. Настоящая работа посвящена изучению возникающих в образцах Nb₃Sn антиузельных дефектах при их облучении протонами с различной энергией и дозой.

Образцы для исследования были предоставлены группой Рене Флюкигера (CERN, Швейцария). Облучение проводилось на циклотроне У-150 НИЦ «Курчатовский институт» при комнатной температуре. Измерения с помощью методов рентгеновской дифракции в нормальном и резонансном режимах проводились на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского источника синхротронного излучения.

1. R. D. Blaugher, R. E. Hein, J. E. Cox and R. M. Waterstrat, "Atomic ordering and superconductivity in A-15 compounds," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 1, no. 6, pp. 539-561, 1969.

Агрегация железосодержащих фуллеренолов в водных растворах по данным малоуглового рассеяния нейтронов и синхротронного излучения

*А. А. Сжогина¹, Ю. В. Кульвелис¹, В. Т. Лебедев¹, В. П. Седов¹,
Т. В. Тропин², Е. А. Кизима²*

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

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Исследования в области синтеза и функционализации биосовместимых железосодержащих наночастиц стимулированы перспективами их применений для повышения контраста в МРТ, целевой доставки лекарств, лечения онкологических заболеваний (гипертермия), чему способствует тот факт, что железо – составная часть биомолекул, в частности гемопротеинов. Металлофуллеренолы $\text{Fe}@C_{2n}(\text{OH})_{30}$ ($n = 30 \div 50$), впервые синтезированы в ПИЯФ НИЦ КИ [1] как прототипы новых эффективных агентов для МРТ, действующих по механизму негативного контрастирования, способных проникать в клетки путем эндоцитоза. Планируя их внедрение в биомедицину, авторы изучили условия структурирования растворов металлофуллеренолов и стабильности молекулярных агрегатов, используя методы малоуглового рассеяния нейтронов и синхротронного излучения.

В целях моделирования физиологических условий применений фуллеренолов $\text{Fe}@C_{2n}(\text{OH})_{30}$, структуру их водных растворов анализировали при переходе от разбавленных к концентрированным системам, варьируя содержание молекул на порядок (0,25–2,0 % масс.), регулируя рН-фактор (3,0 и 7,0, собственный и нейтральный), меняя температуру (20 °С, 37 °С). В итоге экспериментов установлено формирование глобулярных кластеров фуллеренолов, сохраняющих стабильность при переходе от комнатной к физиологической температуре. Показано, что в кислой среде сосуществуют два типа агрегатов (радиусы корреляций $R_C \sim 10$ нм и ~ 2 нм). В нейтральной среде, в выбранном диапазоне концентраций, масштабы структурирования сопоставимы, $R_C \sim 9$ и ~ 1 нм, но несколько ниже, чем в кислом растворе. В связи с этим обсуждаются механизмы и фрактальные модели агрегирования молекул фуллеренолов в водных средах, учитывая молекулярные взаимодействия через водородные связи, силы Ван-дер-Ваальса, дипольные силы за счет магнитных (электрических) моментов фуллеренолов.

*Авторы благодарят за техническую помощь В. М. Гарамуса.
Работа поддержана РФФИ (гр. 14-23-01015 офу_м).*

1. А. А. Сжогина, Ю. В. Кульвелис, В. Т. Лебедев, В. П. Седов. Агрегация содержащих железо фуллеренолов в водных растворах // Журнал прикладной химии. 2015. Т. 88. Вып. 12. С. 124–129.

Эффекты магнитной близости в гетероструктурах кобальт / железо-иттриевый гранат

*В. В. Федоров¹, С. В. Гастев¹, А. М. Коровин¹,
Н. С. Соколов¹, С. М. Сутурин¹, М. Sawada²*

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

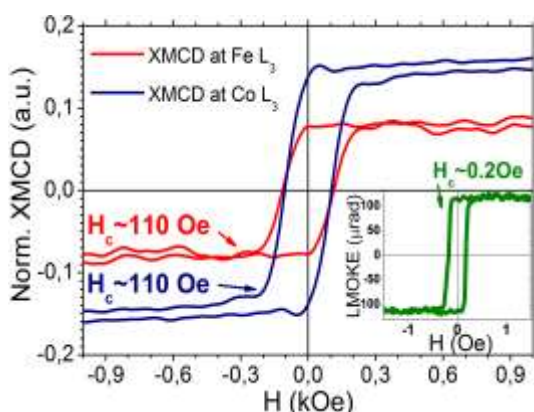
² Synchrotron Radiation Center, Hiroshima University, Kagamiyama, Higashi-Hiroshima, Japan

Пленки железо-иттриевого граната (ЖИГ; $Y_3Fe_5O_{12}$) широко применяются в микроволновых устройствах, рабочая частота которых перестраивается в зависимости от величины внешнего магнитного поля [1]. Гетероструктуры ферромагнетик/феррит, «подмагничивание», в которых осуществлялось бы за счет межслоевого магнитного взаимодействия (эффектов магнитной близости [2]) могут представлять интерес в качестве новых функциональных материалов.

Благодаря избирательности к конкретному химическому элементу для исследования структур Co/YIG применялся метод рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма (XMCD – X-ray magnetic circular dichroism). Измерения проводились *in-situ*, при 300 К, на станции BL14 синхротрона HiSOR (Хиросима, Япония). Слой ферромагнетика – Co ($d = 2-6$ нм), наносился термическим испарением на заранее подготовленные атомно-гладкие тонкие (10 нм) слои ЖИГ (111), выращенные на подложках галлий-гадолиниевого граната методом лазерной молекулярно-лучевой эпитаксии [3]. На рисунке представлены полевые зависимости сигнала дихроизма для энергий L_3 края поглощения Fe и Co, соответствующие кривым намагниченности каждого из слоев гетероструктуры в отдельности. Установлено, что магнитные моменты слоев ЖИГ и Co сонаправлены и перемагничиваются одновременно, причем величина коэрцитивного поля (H_c) превышает H_c пленки ЖИГ до нанесения слоя Co на два порядка (см. вставку). Полученные

результаты доказывают, что между слоями гетероструктуры, существует обменная связь, в результате чего, процессы перемагничивания слоя граната существенно изменяются.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00809 мол_а.



Кривые намагниченности слоев гетероструктуры. На вставке: петля гистерезиса слоя ЖИГ, полученная методом магнитооптического эффекта Керра в продольной геометрии

1. Stancil D.D., Microw. Opt. Technol. Lett. 1989. Vol. 2, № 3. P. 81–85.

2. Manna P.K., Yusuf S.M., Phys. Rep. Elsevier B.V., 2014. Vol. 535, № 2. P. 61–99.

3. N.S. Sokolov, V.V. Fedorov, et. al., J. Appl. Phys. 119, 023903 (2016).

**К динамической теории Лауэ-дифракции
рентгеновских фемтосекундных импульсов
деформированными кристаллами**

Т. Чен

Московский технологический университет, Москва, Россия

Представлена динамическая теория дифракции рентгеновских фемтосекундных импульсов деформированными кристаллами в геометрии на прохождение. Рассмотрены случаи δ -образного импульса и импульса, квадратично промодулированного по фазе. Исследована возможность пространственно-временной фокусировки импульсов в случае механического упругого изгиба кристалла, а также ультразвуковых колебаний кристалла. Показано, что параметры деформации кристалла влияют на динамическую фокусировку импульсов и форму дифрагированных импульсов. При определенной величине изгиба кристалла или амплитуде ультразвуковых колебаний эффект фокусировки пропадает.

Структурный переход от аморфного упорядочения к кристаллическому на примере синтеза искусственных опалоподобных структур

А. В. Чумакова¹, А. П. Чумаков^{1, 2}, А. А. Мистонов^{1, 3}, И. С. Шишкин¹

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

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Впервые методом шликерного литья были получены фотонные стекла и определена их структура. Традиционно фотонные стекла получают методом вертикального осаждения или седиментации из коллоидного раствора. Шликерное литье представляет собой метод формования изделий из концентрированной суспензии порошка в жидкости на стенках гипсовой формы. В данной работе мы использовали коллоидный раствор монодисперсных полистирольных сферических частиц диаметром 200 ± 10 нм, которые были осаждены на стенки гипсовой камеры, и впоследствии перенесены на стеклянную подложку. Образцы были исследованы методами СЭМ и МУРД на установке BM-26 Европейского центра синхротронного излучения (ESRF, Гренобль).

В начальный момент времени осаждения сферические частицы образуют разупорядоченный массив, однако по мере уменьшения скорости всасывания растворителя в гипсовую форму, формируются зерна с плотнейшей шаровой упаковкой частиц. Методом СЭМ установлено, что зерно состоит из упорядоченных плотно упакованных гексагональных слоев, выходящих на поверхность пленки плоскостями (111), (100), (110). Средний диаметр частицы, по данным СЭМ, составил 203 ± 5 нм. Толщина пленки зависит от времени осаждения на стенки камеры и варьировалась от 1 до 1,8 мм. При исследовании данных образцов методом МУРД были получены типичные картины дифракции от поликристаллической структуры. Сканирование синхротронным пучком сечением 150×150 мкм по толщине образца удалось пронаблюдать переход от случайной упаковки сфер, образующейся в начале синтеза, к упорядоченной поликристаллической структуре по мере уменьшения скорости осаждения. Установлено, что положения пиков на зависимости интенсивности рассеяния от переданного импульса составляет $Q_{(111)} = 0,0346 \pm 0,0002 \text{ нм}^{-1}$ и $Q_{(220)} = 0,0583 \pm 0,0002 \text{ нм}^{-1}$, что соответствует отражениям от плоскостей (111) и (220) для ГЦК структуры с параметром решетки $a_0 = 290 \pm 3$ нм.

Установлено, что структура фотонного стекла, полученного по новой технологии, зависит от скорости всасывания растворителя и изменяется от разупорядоченного массива частиц до поликристаллической структуры. Применение данной технологии позволяет получать фотонные стекла на основе монодисперсных сферических частиц толщиной до нескольких миллиметров.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда поддержки научно-проектной деятельности студентов, аспирантов и молодых ученых «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-32-80107 «мол_эв_а».

Дефекты кристаллической структуры инвертированных опалов

И. С. Шишкин¹, А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Дубицкий¹,
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

Инвертированные опалоподобные структуры (ИОПС) получали путём заполнения пустот опала, синтезированного из полистирольных микросфер диаметром 540 ± 10 нм, уложенных в плотную шаровую упаковку с гранцентрированной кубической (ГЦК) структурой. При растворении микросфер в толуоле образуются упорядоченные пористые материалы. Синтез образцов проводился студентами и аспирантами факультета наук о материалах Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова.

Методом ультрамалоугловой дифракции синхротронного излучения (USAXS) было показано, что невозможно вырастить пленки ИОПС с идеальной ГЦК-структурой [1–3]. Несовершенство кристаллической структуры ИОПС на основе Со изучали методом USAXS, используя в качестве образцов пленки толщиной в $n = 0,5; 2; 7; 17; 20$ и 26 слоёв, где 1 слой соответствует плотноупакованным сферам в гексагональном порядке. Производили сканирование обратного пространства в диапазоне углов $[-65^\circ \div +65^\circ]$ с шагом 1, в котором кроме дифракционных пиков, соответствующих ГЦК структуре, наблюдались дифракционные стержни, соответствующие сбивке в чередовании слоев вдоль кристаллографической оси [111]. Зависимость распределения интегральной интенсивности вдоль стержней для различных толщин образцов показала, что с увеличением числа слоёв количество стержней не уменьшается, что свидетельствует о неизбежном появлении дефектов структуры в процессе роста. Экспериментально показано, что ГЦК-структура не может быть индцирована в образцах с малым числом слоев ($n < 3$). Установлено, что большинство опалоподобных кристаллов и полученных из них инвертированных опалов с ($n > 3$) лишь на 75–85 % состоят из ГЦК кристаллитов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №14-22-01113 офи_м).

1. Grigoryeva N.A. et. al. // Phys. Rev. B., Vol. 84, 2011. P. 064405.

2. Самусев А.К., Синев И.С., Самусев К.Б., Рыбин М.В., Мистонов А.А., Григорьева Н.А., Григорьев С.В., Петухов А.В., Белов Д.В., Трофимова Е.Ю., Курдюков Д.А., Голубев В.Г., Лимонов М.Ф. // Физика твёрдого тела, т. 54, вып. 10, 2012, стр. 1946 – 1955.

3. Chumakova A.V. et. al. // Phys. Rev. B., Vol. 90, 2014. P. 114103.

ЯМР релаксация воды в строительных материалах при циклическом изменении температуры

В. Я. Адельсон, Ю. С. Чернышев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Циклические изменения температуры могут оказывать существенное влияние на состояние сооружений из бетона и изделий из керамики. При периодическом замораживании и размораживании флюида в порах структура порового пространства может изменяться, что отражается на прочностных характеристиках данных материалов и в конечном итоге может определить «время жизни» строения или изделия. Целью данной работы является исследование влияния циклического замораживания насыщенных водой образцов пористой керамики и бетона на релаксационные характеристики ядерного магнитного резонанса. Актуальность данной работы подтверждается возможностью применения ее результатов для анализа морозостойкости строительных материалов

В ходе данной работы было исследовано влияние циклического замораживания насыщенных водой пористых образцов на релаксационные характеристики ЯМР. По результатам эксперимента был выявлен ряд зависимостей, которые несут в себе следующую информацию:

- Зависимость времен релаксации от номера цикла заморозки позволила определить, что в ходе эксперимента изменилась связность пор.
- Изменение относительного содержания компонент показала, что количество макропор возросло, что говорит об изменении структуры образца после проведения 60 циклов изменения температуры.
- Эксперимент на основе насыщения образцов тяжелой водой показал, что наличие парамагнитных центров на поверхности пор слабо сказывается на релаксацию.

1. P.T.Callaghan, Translation Dynamics and Magnetic Resonance, Oxford, 2011.
2. Квантовая радиофизика. Магнитный резонанс и его приложения. — Изд-во С-Петерб. ун-та, 2009, В. И. Чижик — 700 с.
3. F. Orazio, J. Tarczoz, W. Halperin, K. Eguchi, T. Mizusaki, Appl. Phys., 65(2), 1989, 742–751.
4. K. Brownstein, C. Terr, Phys. Rev. A19, 1979, 2446.
5. W. Halperin, F. Orazio, F. Bhattacharia, J. Tarczoz, Molecular dynamics in restricted geometries: Wiley Interscience Publications, New York, 1989, 311-350.
6. Т. А. Захарченко Ядерная магнитная релаксация жидкостей в пористых средах. Казань, 1972, 72 с.

Исследование структурных и проводящих свойств Fe/Ni-нанотрубок

Н. Е. Алешова, А. Л. Козловский, К. К. Кадыржанов

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

Среди магнитных наноматериалов особое место занимают многослойные или двухкомпонентные структуры. Внимание к ним обусловлено обнаружением у них эффекта гигантского изотропного магнетосопротивления. Одним из вариантов повышения величины магниторезистивного эффекта является получения многослойных структур в виде наноструктур в форме полых цилиндрических трубок. Для нанотрубок реализуется геометрия магниторезистивного эффекта, когда электрический ток перпендикулярен границам раздела слоев или магнитных доменов в двухкомпонентных структурах, что невозможно осуществить в многослойных пленках с плоской геометрией. В случае наноструктур электроны проводимости вынуждены пересекать магнитные слои доменов с периодически антипараллельной направленностью магнитных моментов, создаваемых доменами структуры, что приводит к увеличению эффекта рассеяния по сравнению с многослойными плоскими пленками. Одним из наиболее перспективных материалов являются нанотрубки на основе сплава железа/никеля из-за их превосходных магнитных свойств, высокой намагниченности.

В данной работе исследована зависимость изменения фазового состава от прикладываемой разности потенциалов Fe/Ni нанотрубок, полученных методом темплатного синтеза, а также изменение проводящих свойств от элементного состава. В качестве темплатов использовались трековые мембраны на основе ПЭТФ толщиной 12 мкм, плотностью пор $1.0E+09$ пор/см² и диаметрами 110 ± 5 нм. Диапазон разности потенциалов составляет от 1,0 В до 2,0 В, с шагом 0,2 В. Контроль за процессом электроосаждения ведется путем хроноамперограмм, согласно которым была рассчитана объемная скорость осаждения, величина которой позволяет контролировать геометрические параметры роста получаемых Fe/Ni нанотрубок. При увеличении плотности тока за счет увеличения разности потенциалов на электродах наблюдается адсорбция на катоде примесей водорода, анионов солей, молекул гидроксидов, часть которых выпадает в осадок на поверхность мембраны, однако часть включается в кристаллическую структуру нанотрубок. При этом включение примесей влияет на проводящие свойства за счет деформации кристаллической решетки. Показано, что увеличение концентрации железа, а также примесей в структуре нанотрубок приводит к уменьшению проводимости.

Полиморфные превращения в $\text{Cu}_{1\pm x}\text{Ag}_{1\pm x}\text{Se}$ ($x = 0; 0,5; 0,6$)

Ю. И. Алыев^{1, 2}, Ю. Г. Асадов¹, В. К. Гусейнова²

¹ Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

² Институт профессионального развития работников образования, Баку, Азербайджан

Соединение AgCuSe образуется при соотношении $\text{Cu}_2\text{Se}:\text{Ag}_2\text{Se}=1:1$ по перитектической реакции при температуре 1033 [1]. Структура низкотемпературной модификации AgCuSe в [2] определена как тетрагональная с параметрами решетки $a=4.083 \text{ \AA}$, $c=6.30 \text{ \AA}$, $Z=2$. Позднее [3] кристаллическая структура AgCuSe определена как орторомбическая параметрами решетки $a=4.105 \text{ \AA}$, $b=20.350 \text{ \AA}$, $c=6.310 \text{ \AA}$, $Z=10$. Последняя является сверхструктурой тетрагональной решетки. Параметр b_p орторомбической решетки кратен пяти параметрам b_t тетрагональной решетки ($b_p=5b_t$). По данным [3] в орторомбической структуре AgCuSe атомы Ag находятся в плоскостях, перпендикулярных оси c . Около каждого из них располагаются 4 Ag на расстоянии 2.96 \AA и 6 Se на расстояниях 2.67(4 Se), 3.59(1 Se) и 3.64(1 Se). Атомы Se образуют вытянутые тетраэдры, в центре которых находятся атомы Cu . Расстояние $\text{Se-Se}=3.03 \text{ \AA}$, $\text{Cu-Se}=2.06\text{-}2.50 \text{ \AA}$ и наименьшее расстояние $\text{Cu-Ag}=2.98 \text{ \AA}$. В [4] показано, что орторомбическая модификация при 504 К превращается в высокотемпературную ГЦК модификацию с параметрами решетки $a=6.082 \text{ \AA}$.

В данной работе рассматриваются структурные аспекты полиморфных превращений в AgCuSe и $\text{Ag}_{1\pm x}\text{Cu}_{1\pm x}\text{Se}$.

С этой целью, были синтезированы и выращены монокристаллы AgCuSe , $\text{Ag}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Se}$ и $\text{Ag}_{0.4}\text{Cu}_{1.6}\text{Se}$. Условия синтеза и выращивания монокристаллов указанных составов описаны в [4].

После записи дифракционных отражений при комнатной температуре включали печь и через каждые 50 К проводили записи. Для кристалла AgCuSe зафиксированные дифракционные отражения остаются постоянными до температуры 493 К. При 545 К все зафиксированные дифракционные отражения исчезают, и образуется четыре новые дифракции с индексами (111), (200), (220) и (300) принадлежащие высокотемпературной ГЦК модификации с параметрами решетки $a=6.082 \text{ \AA}$, $Z=4$, *пр.гр. Fm3m*. Температура равновесия между модификациями $T_0=504\pm 1 \text{ К}$. Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны тепловое расширения.

Показано, что кристаллы $\text{Ag}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Se}$ при комнатной температуре двухфазные и состоит из орторомбической Ag_2Se с параметрами решетки $a=4.333 \text{ \AA}$, $b=7.062 \text{ \AA}$, $c=7.764 \text{ \AA}$ и орторомбической AgCuSe с параметрами решетки $a=4.105 \text{ \AA}$, $b=20.350 \text{ \AA}$, $c=6.310 \text{ \AA}$. В дифракционных картинах до 423 К изменение происходит. При 488 К в прежнем интервале углов фиксируется четыре новых отражения с индексами (200), (220), (311) и (400) которые

принадлежат высокотемпературной ГЦК модификации с параметрами решетки $a=6.107 \text{ \AA}$.

Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны тепловое расширения обеих орторомбических и кубических фаз $\text{Ag}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Se}$.

Кристаллы $\text{Ag}_{0.4}\text{Cu}_{1.6}\text{Se}$ при комнатной температуре двухфазные и состоит из AgCuSe и Ag_2Se . При 573 К обе модификация превращается в высокотемпературную ГЦК модификацию с параметром решетки $a=5.896 \text{ \AA}$, $Z=4$, *пр.гр.* $Fm\bar{3}m$, а температура равновесия между модификациями равно $T_0=540 \text{ K}$.

Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны тепловое расширение обеих орторомбических и ГЦК модификаций. Анизотропия теплового расширения, рассчитанная в основных кристаллографических направлениях является одной из важных причин температурной стабильности кристаллической структуры, в которой с повышением температуры происходит превращение структуры низкой симметрии в кубическую структуру. Превращение в рассмотренных кристаллах обратимо и происходит по типу монокристалл-монокристалл.

1. Агаев М.И. и др. Докл. АН Азерб.ССР, 1971, т.27, №5, с.20.

2. Earley I.W. Amer. Mineralogist, 1950, v.35, 5-6, p.337.

3. Frueh A.J., et al. // Z. Krist., 1957, v.108, p.389.

4. Кязумов Ш.К. и др. // Докл. АН Азерб. ССР, 1986, т.12, №11, с.33.

Влияние толщины слоя Ni на МЭ-эффект мультиферроика – композита Ni-ЦТС-Pt

А. А. Амиров¹, А. М. Исмаилов², Д. М. Юсупов¹, Н. З. Абдулкадирова¹

¹ *Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия*

² *Дагестанский государственный университет, физический факультет,
Махачкала, Россия*

В последнее время в исследовании мультиферроиков, все большее внимание уделяется композитным системам, благодаря обнаруженным в них значениям магнитоэлектрического (МЭ) эффекта, пригодным для практических приложений. В этой связи, слоистые мультиферроики демонстрируют интересные с фундаментальной точки зрения и прикладных аспектов свойства. Образцы композитов Ni-PZT-Pt были получены в атмосфере аргона при давлении около $3 \cdot 10^{-3}$ Торр путем магнетронного распыления мишеней Ni и Pt на предварительно поляризованный диск ЦТС-19 толщиной $d=1$ мм и диаметром 10 мм. Напыление слоев Ni и Pt было проведено путем подбора оптимальных рабочих условий (температура распыления, время, давление). В результате серии экспериментов были получены образцы с различными толщинами слоев Ni и Pt.

МЭ-эффект измерялся путем измерения переменного напряжения, возникаемого на концах образца, при его внесении в переменное магнитное и постоянное подмагничивающее поле. В нашем случае постоянное подмагничивающее поле было равно нулю.

Для всех образцов в области 83,6 kHz наблюдается резонансный максимум, который соответствует электромеханическому резонансу, и величины амплитудных значений МЭ-коэффициента для исследованных образцов отличаются. Рост МЭ-коэффициента с увеличением толщины магнитострикционного слоя объясняется в рамках теории, описанной в работе [1] и связано с выражением для МЭ-коэффициента по напряжению, полученным путем решения совместного уравнения по электростатике, магнитостатике и эластодинамике [2]. Для образца с напылением Ni по обеим граням, МЭ-коэффициент уменьшается, что может быть связано с противоположным направлением вектора поляризации, генерирующемся за счет магнитострикции каждого из магнитострикционных слоев. Полной компенсации МЭ-сигнала в этом случае не наблюдается за счет неоднородной адгезии слоев и разной их толщины.

1. Д.А. Филиппов., ФТТ. 47, 1082 (2005).

2. С.А. Гриднев, Ю.Е Калинин и др., ФТТ. 57, 1349 (2015).

Pure and (Fe, Co, Ni) doped α -MnO₂ nanowires: optimization of catalysts local structure for oxygen reduction

O. Boytsova^{1, 2}, A. Baranchikov¹, M. Lehtimäki³, P. Krtil³, V. Ivanov^{1, 2}

¹ *Kurnakov Institute of Inorganic Chemistry Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

² *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

³ *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Republic*

The role of the local structure and/or dynamic active site formation can be conveniently demonstrated on manganese oxides which combine acceptable activity in oxygen evolution (OER) and oxygen reduction reaction (ORR) with rich polymorphism. There is also a wide portfolio of synthetic techniques to control the catalysts reactivity due to large variability of oxidation state of the MnO₂. The structural differences between the manganese dioxides clearly show a pronounced effect on the insertion electrochemistry the connection between the crystal structure and electrocatalytic behavior has yet to be substantiated. The electrocatalytic activity of MnO₂ nanowires of different polymorphs was compared by Cheng et al [1] who used the limiting currents obtained in rotating disc electrode experiments to prove superiority of the alpha polymorph over beta and gamma. A decrease of the ORR activity of the MnO₂ with increasing pH suggests that the reduction process requires partially reduced Mn(III)OOH moieties on the surface and the whole process ought to be rate controlled by the oxidation of Mn(IV)OOH-O species. We focus on theoretical and experimental aspects of an oxide surface optimization for ORR [2]. Various pure and transition metal (Fe, Co, Ni) doped α -MnO₂ nanowires were prepared by microwave-assisted hydrothermal synthesis and electrochemically characterized to validate density functional theory (DFT) based predictions of the oxidation state and local structure effects (EXAFS, XPS) on the catalytic activity of α -MnO₂ catalysts in ORR. Both theory and experiments conclude that the highest activity in ORR is to be expected in the case of clustered Mn³⁺ sites which yield activity comparable with that of the polycrystalline Pt. These active sites have to be formed under in-operando conditions and their formation is hindered in doped α -MnO₂ catalysts.

This work was supported by RFRB (projects #14-29-04100 and #16-33-50005).

1. F. Cheng, Y. Su, J. Liang, Z. Tao, J. Chen, Chem. Mat., 22 (2010), pp. 898–905.
2. M. Lehtimäki, H. Hoffmannová, O. Boytsova, Z. Bastl, M. Busch, N. Bendtsen Halck, Ja. Rossmeisl, P. Krtil, Electrochimica Acta, 191 (2016) 452-461.

Control of the formation of NH_4TiOF_3 mesocrystals: effects of polyethylene glycols

O. Boytsova^{1, 2}, *A. Sutherland*¹

¹ *Aston University, Birmingham, UK*

² *Kurnakov Institute of Inorganic Chemistry Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Currently approaches to mesocrystal (MC) formation are somewhat ad hoc and thus many applications of these fascinating materials remain largely unachievable. The principle underlying reason for this is that MC formation processes are often still too poorly understood. Based on natural crystallisation phenomena, chemists have developed a working model of MC formation whereby polymers can be used to form organised inorganic structures with great success [1, 2]. This said, the shape, period, size and morphology of self-organized structures (MCs) generated in this manner show strong structural dependence upon the polymer used. Thus it is currently very hard to be able to predict a formation system that will give a specific crystal morphology. This is key for applications as only certain MC morphologies may give the desired properties. Generating a predictive understanding of MC formation is vital as MCs have superb potential for optical, energy, materials etc applications [3, 4].

We demonstrate that it is possible to obtain mesocrystals of NH_4TiOF_3 using a non-classical method employing a gel of $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$ and H_3BO_3 with simple linear poly(ethylene glycols) templates. The use of PEG with different molecular weights (PEG-200, -400, -2000 & -6000) produced a range of different NH_4TiOF_3 MCs. Dimension of the MC “squares” and thickness decrease with the length of PEGs. This arises as the polymer (and clearly its molecular weight profile) plays an important role in both the controlling hydrolysis of $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$ and the self-assembly processes, results were also confirmed by XRD, Raman, SEM, FTIR methods as well. A potential use for the NH_4TiOF_3 mesocrystals has been demonstrated. By heat treatment the mesocrystals of NH_4TiOF_3 transform to well-oriented assemblies of TiO_2 nanoparticles with average sizes of between several and tens of nanometers.

O.B. gratefully acknowledges the support of the European Commission for a Marie Curie Inter-European Fellowship (Grant no. 661317) and. RFRB (project #16-33-80144).

1. H. Cölfen and M. Antonietti, *Angew. Chem.*, 2005, 44, 5576.
2. L. Zhou, D.S. Boyle, and P. O'Brien, *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, 130, 1309.
3. Ma M.-G. & Cölfen H. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 2014, 19, 56.
4. L. Zhou, J. Chen, C. Ji, L. Zhou and P. O'Brien, *CrystEngComm*, 2013, 15, 5012.

Антиферромагнитный дихроизм в сложном многоподрешеточном мультиферроике CuV_2O_4

К. Н. Болдырев¹, М. Н. Попова¹, Р. В. Писарев²

¹ *Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

В работе [1] на основании экспериментов с кристаллом метабората меди CuV_2O_4 было заявлено, что удалось управлять киральностью кристалла с помощью магнитного поля. Это заявление вызвало острую дискуссию в научной печати, так как оно казалось противоречащим фундаментальным симметричным принципам (см., например, [2]). Проведя исследование экситонных переходов в CuV_2O_4 в магнитном поле, с высоким спектральным разрешением, мы поставили точку в этой дискуссии [3]. Мы обнаружили линейный дихроизм (ЛД) в кристаллографически изотропной базисной плоскости тетрагонального кристалла метабората меди, появляющийся при антиферромагнитном упорядочении, и показали, как он мог симулировать «магнитный контроль киральности». Физическая природа ЛД в CuV_2O_4 – магнитное давидовское расщепление экситонных линий. Обнаруженный нами ЛД высокочувствителен к малейшим изменениям в спиновой подсистеме, что позволяет рассматривать его как новый метод исследования фазовых переходов и магнитных структур в сложных магнетиках. В частности, в метаборате меди мы зарегистрировали расщепление перехода в несоразмерную фазу на два перехода и определили их природу, а также показали, что в сложной фазовой диаграмме метабората меди реализуются различные эллиптические спиральные спиновые структуры [3].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№15-32-20613) и гранта Президента РФ для поддержки молодых ученых (МК-3521-2015.2).

1. M. Saito, K. Ishikawa, K. Taniguchi, T. Arima, Phys. Rev. Lett. 101, 117402 (2008).
2. S. W. Lovesey, U. Staub, J. Phys.: Condens. Matter 21, 142201 (2009).
3. K. N. Boldyrev, R. V. Pisarev, L. N. Bezmaternykh, M. N. Popova, Phys. Rev. Lett., 114, 247210 (2015).

Гигантское электрон-фононное взаимодействие в мультиферроике $\text{PrFe}_3(\text{VO}_3)_4$: бифуркация во внешнем магнитном поле

К. Н. Болдырев¹, М. Н. Попова¹, Т. Н. Станиславчук², Л. Н. Безматерных³

¹ *Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Department of Physics, New Jersey Institute of Technology, Newark, NJ, USA*

³ *Институт физики им. Л. В. Киренского, Красноярск, Россия*

Редкоземельные (РЗ) ферробораты с общей формулой $R\text{Fe}_3(\text{VO}_3)_4$ ($R = \text{Y}, \text{La-Lu}$) имеют тригональную нецентросимметричную структуру природного минерала хантита. Серия проведенных ранее исследований показала, что в таких кристаллах наблюдается антиферромагнитное упорядочение подсистемы железа при температурах около 40 К. В ряде ферроборатов наблюдался гигантский магнито(ди)электрический эффект, и было найдено, что данные соединения относятся к новому классу мультиферроиков. Ранее нами было показано, что спектроскопия в терагерцовом диапазоне позволяет наблюдать магнитоупругие взаимодействия в ферроборатах [1]. Продолжением исследований стала работа [2], посвященная терагерцовой спектроскопии монокристалла $\text{PrFe}_3(\text{VO}_3)_4$, с использованием синхротронного источника излучения. При понижении температуры наблюдались спектральные проявления взаимодействия низкочастотного фонона с близким по частоте электронным возбуждением РЗ иона. Моделирование экспериментальных данных позволило найти величину этого взаимодействия ($W = 14,8 \text{ см}^{-1}$) – рекордную для подобных соединений.

Дальнейшие эксперименты по исследованию спектров отражения в сильных магнитных полях (до 10 Т) позволили обнаружить ряд новых эффектов. Так, при малом увеличении магнитного поля наблюдалось скачкообразное расщепление связанной электрон-фононной моды (бифуркация). Проведенное моделирование позволило объяснить это явление и показало, что величина электрон-фононного взаимодействия не зависит от магнитного поля. Удалось также промоделировать поведение связанных электрон-фононных мод в полях $H > H_{\text{SF}}$ ($H_{\text{SF}} = 4,2 \text{ Т}$ при температуре 1,5 К – поле спин-флоп перехода со скачкообразной переориентацией магнитных моментов от кристаллографической оси c к плоскости ab).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Грант № 14-12-01033).

1. K. N. Boldyrev, T. N. Stanislavchuk, S. A. Klimin, M. N. Popova, L. N. Bezmaternykh, Phys. Lett. A 376, 2562 (2012).

2. K.N. Boldyrev, T. N. Stanislavchuk, A. A. Sirenko, L. N. Bezmaternykh, M. N. Popova, Phys. Rev. B Rapid Comm. 90, 121101(R) (2014).

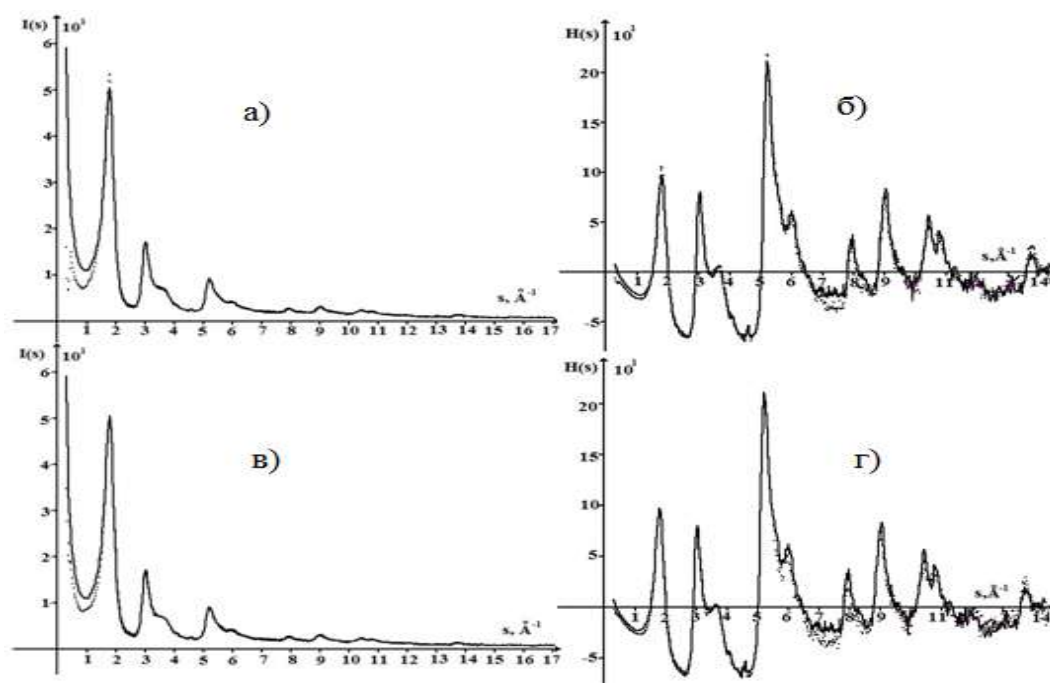
Сравнение образцов шунгита до и после размола

К. И. Боржова, Д. В. Логинов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

В данной работе приведены результаты рентгенографического анализа образцов шунгита до и после размола. Образцы были из месторождения Шуньга. Размол образцов проводился на планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7 premium line (материал ступки и шаров – малахит, диаметр шаров 10 мм) в воздушной среде в течение трех- и пятичасового размола.

Рентгенограммы образцов полученные на ДРОН-6 в МоК α -излучении представлены на рисунке.



Кривые распределения интенсивности рассеяния $I(s)$ и s -взвешенной интерференционной функции $H(s)$ (исходный образец, измельченный образец): а), б) для исходного образца и размолотого в течение 3 часов; в), г) для исходного образца и размолотого в течение 5 часов

Кривая $H(s)$ исходного и образцов подвергнутых размолу, типичны для большинства природных углеродных материалов. На графиках $I(s)$ хорошо видно четко выраженный первый максимум, который характерен для отражения (002) на рентгенограмме графита, так же наблюдается перераспределение интенсивности, что свидетельствует о нарушении закона интерференции.

Небольшое время размола не приводит к изменению вида кривых $I(s)$ и $H(s)$. Возможный вывод об изменении структуры можно будет сделать после расчета характеристик ближнего порядка.

Исследование МСМ41-С1 методами адсорбционной и жидкостной порометрии

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*

Упорядоченные нанопористые среды типа МСМ41 в настоящее время являются перспективными материалами для использования в области химической фильтрации [1]. Для максимальной эффективности таких материалов необходимо представление об их характеристиках, таких как удельные объем пор и площадь поверхности, плотность каркаса, функция распределения пор по размерам и взаимодействие поверхности с другими средами. Исследование характеристик пористых сред ведется с использованием адсорбции-десорбции газов, ртутной порометрии, нейтронография [2, 3]. В последние годы были предложены дополнительные экспериментальные методики, основанные на методе жидкостной порометрии [4, 5], позволяющие получить дополнительную информацию о строении пористых сред и характере взаимодействия поверхности пористой среды с жидкостями.

Настоящая работа посвящена исследованию структуры гидрофобизированного МСМ41-С1 методами газовой адсорбции, жидкостной порометрии и дополнительными методиками жидкостной порометрии. В качестве дополнительных методик были использованы методика частичного заполнения пористой среды несмачивающей жидкостью и методика исследования временной релаксации несмачивающей жидкости в пористой среде при различных температурах. Был использован промышленный МСМ41 (#643645-25G, Sigma-Aldrich). Гидрофобизация образца была проведена в лаборатории профессора Г. В. Лисичкина (МГУ им. М. В. Ломоносова). В качестве несмачивающей жидкости была использована дистиллированная вода.

1. L. Coiffard, V. Eroshenko, J. of Colloid and Interface Science, 300 (2006), doi:10.1016/j.jcis.2006.03.054.
2. S. Lowell, J. E. Shields, M. A. Thomas, and M. Thommes, Characterization of Porous Solids and Powders: Surface Area, Pore Size and Density (Springer Netherlands, 2004) pp. 1 – 350, doi:10.1007/978-1-4020-2303-3.
3. E. Mamontov, Yu. A. Kumzerov, and S. B. Vakhrushev, Phys. Rev. E 71, 061502 (2005), doi:10.1103/PhysRevE.71.061502.
4. V. D. Borman, A. A. Belogorlov, et. al. Physics Letters A, 378 (2014), doi:10.1016/j.physleta.2014.07.045.
5. V. D. Borman, A. A. Belogorlov, V. N. Tronin, Coll. and Surf. A: Phys. and Engin. Aspects, (2015), doi:10.1016/j.colsurfa.2015.08.022.

Ионная проводимость в твердых растворах на основе церата бария

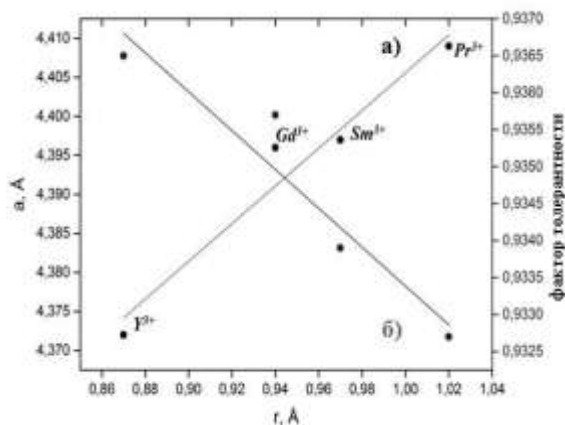
Е. А. Булаева, Д. А. Калганов, Ю. А. Луцицкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

В настоящее время особый интерес представляют соединения на основе церата бария, обладающие ионопроводящими свойствами по катионам редкоземельных металлов, анионам кислорода или протонным группировкам [1]. Получить такие материалы можно разновидностью золь-гель метода (м. Печини) или путем твердофазной реакции в системе $\text{BaCO}_3 - \text{CeO}_2 - \text{Me}_2\text{O}_3$ ($\text{Me}^{3+} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}$) при нагревании.

Качественный рентгенофазовый анализ образцов проводили на дифрактометре ДРОН-3 ($\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучение). Измерения ионной проводимости на переменном токе осуществляли с помощью измерителя RLC Aktakom AM-3028 при частоте 10^5 Гц.

Данные рентгеновского анализа показывают, что в данной оксидной системе при температуре синтеза 1223 К образуются твердые растворы $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$, имеющие структуру типа перовскита (пространственная группа $Pm-3m$).



Зависимости параметра a элементарной ячейки (а) и фактора толерантности (б) от величины ионного радиуса в фазах состава $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$

Для соединений, изоморфных перовскиту, установлено, что с увеличением ионного радиуса допанта фактор толерантности τ линейно уменьшается (рис. б). При этом частичное замещение ионами редкоземельных металлов в фазах состава $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$ приводит к монотонному возрастанию параметра a и объема V элементарной ячейки (рис. а). В интервале температур 300–973 К на переменном токе исследована зависимость ионной проводимости синтезированных фаз от обратной температуры. Показано, что величина энергии активации уменьшается, а ионная проводимость возрастает с увеличением ионного радиуса примесного иона. Максимальные значения ионной проводимости достигаются в фазе состава $\text{BaCe}_{0,9}\text{Gd}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$.

1. D. Medvedev, A. Murashkina et al., J. Prog. Mater. Science. 60, (2013).

Теплофизические свойства объемно-аморфных сплавов Cu-Zr-Ti

В. А. Быков, Т. В. Куликова, К. Ю. Шуняев

Институт металлургии УРО РАН, Екатеринбург, Россия

Исследование объемно-аморфных металлических сплавов является одним из наиболее обширных и бурно развивающихся направлений современного материаловедения. Среди множества таких сплавов особое место занимают системы на основе Cu-Zr. Указанные системы обладают отличными механическими свойствами, коррозионной стойкостью и высокой термической стабильностью. Небольшие добавки других металлов (Al, Ni, Ti, и др.) приводят к еще большему увеличению стеклообразующей способности и возможности получения объемно-аморфных сплавов с критической толщиной, достаточной для промышленного использования.

Основным вопросом является природа стеклообразующей способности систем на основе Cu-Zr, а также ее зависимость от состава системы и концентрации добавок других элементов. Цель работы – получение информации о ряде важнейших структурно-чувствительных свойств сплавов $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50-x}\text{Ti}_x$ ($x = 2, 4, 6, 8$ ат. %), таких как теплопроводность, температуропроводность и коэффициент теплового расширения.

Синтез образцов сплавов $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50-x}\text{Ti}_x$ ($x = 2, 4, 6, 8$ ат. %) в объемно-аморфном состоянии выполнен методами электродугового сплавления и вакуумного литья. Получены температурные зависимости теплопроводности, температуропроводности и термического расширения сплавов $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50-x}\text{Ti}_x$ ($x = 2, 4, 6, 8$ ат. %) в аморфном состоянии. Полученные данные имеют как фундаментальное значение, в связи с упомянутой проблемой объяснения аморфизирующей способности, так и большую практическую значимость в контексте промышленного применения указанных сплавов. Проведен анализ взаимосвязи теплофизических свойств и стеклообразующей способности аморфизирующихся сплавов Cu-Zr-Ti.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00835).

Наноструктуры никеля в пористом Al_2O_3 : структурно-фазовое состояние, локальная атомная и электронная структуры, катодные свойства в реакциях выделения водорода

*Р. Г. Валеев¹, А. И. Чукавин¹, В. В. Кривенцов^{1, 2},
Т. С. Картапова¹, В. В. Сташкова³*

¹ Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

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

³ 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]. Никель особо выделяется среди них тем, что, обладая высокой коррозионной стойкостью в кислых и щелочных средах, по сравнению с металлами платиновой группы имеет низкую стоимость и достаточно широко распространен [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 никеля, 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, локальная атомная и электронная структуры, обуславливающие химическую активность никеля.

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

Работа выполнялась в рамках проекта программы «Умник» (грант № 0020390).

1. L.A. Kibler, ChemPhysChem 7, 985 (2006).
2. W.A. Badawy, H. Nady, et al., Int. J. Hydr. Energy 39, 10824 (2014).
3. J. Panek, A. Budniok, Surf. Interface Anal. 40, 237 (2008).
4. D.A. Dalla Corte, C. Torres, et al., Int. J. Hydr. Energy 37, 3025 (2012).

Структура областей ближнего порядка анодных пленок WO₃

А. И. Васильев, Л. А. Алешина

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

При определении структуры аморфных материалов возникают сложности, обусловленные отсутствием дальнего порядка в расположении атомов.

Обработка результатов рентгенографического эксперимента проводилась методом Финбака - Уоррена. Рассчитывались значения радиусов и размытий координационных сфер и координационные числа. Результаты расчета сравнивались с соответствующими данными, рассчитанными для кристаллических модификаций оксидов и гидроксидов вольфрама. Было установлено, что координационные числа N_{ij} близки по значениям к данным для порошкового анодного аморфного оксида, ближний порядок в котором ранее был идентифицирован с расположением атомов в фазе WO₃ 1/3H₂O.

В ходе данной работы была определена структура областей ближнего порядка анодных пленок WO₃, следующим образом:

1) На основе полученных рентгенографических данных можно построить кластеры, устанавливающие расположение атомов в области ближнего упорядочения, только в сочетании с методами компьютерного моделирования. Кривые распределения интенсивности рассеяния рассчитывались в рамках модели хаотически разориентированных нанокристаллов (модели Дебая) по формуле

$$I(s) = \frac{1}{N_{\phi}} \left[\sum_{i=1}^N f_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{2} \cdot [f_i f_j^* + f_i^* f_j] \cdot \frac{\sin(s \cdot r_{ij})}{s \cdot r_{ij}} \exp(-0.5\sigma_{ij}^2 s^2) \right]$$

и сравнивались с экспериментальными. Критерием служили факторы недоверности, рассчитанные по стандартным формулам. Было определено, что наиболее близким к эксперименту оказался результат расчета для кристалликов размерами 15-7-4 Å, имеющих моноклинную структуру.

2) Для более точного результата была проведена релаксация методом молекулярной динамики. В качестве исходных были использованы кластеры различных размеров для гексагональной, моноклинной и тетрагональной фаз оксида вольфрама и фазы WO₃1/3H₂O. При моделировании использовался парный потенциал взаимодействия в форме Борна-Майера-Хиггинса:

$$U = \frac{q_1 q_2}{r_{ij}} + A_{ij} \cdot \exp\left(-\frac{r_{ij}}{R_0}\right) + \frac{C_{ij}}{r_{ij}}$$

В результате было определено, что наиболее близким к эксперименту оказался кластер для кристалликов размерами 15-15-16 Å, который имеет моноклинную структуру.

Исследование методом МУРР структурных превращений полидиметилфенилсилоксана (ПДМФС) и систем «ПДМФС – наполнитель» в температурном интервале 20–600 °С

И. Б. Глебова, В. В. Голубков

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия

Изучены структурные превращения методом МУРР полидиметилфенилсилоксана (ПДМФС) и систем «ПДМФС – наполнитель» в температурном интервале 20–600 °С при нагреве непосредственно в приборе и при нагреве до определенных температур и измерении при комнатной температуре. В качестве наполнителей использовались оксиды и силикаты.

Информация об изменениях структуры получена из анализа температурных зависимостей интенсивности (I) МУРР, измеренной при некоторых фиксированных углах, равных 10' и 400', и кривых зависимости $\lg I$ от s^2 при различных температурах нагрева полимера и полимера с наполнителями.

На кривых зависимости I МУРР от температуры в случае ПДМФС до температур 450–500 °С наблюдается рост I МУРР, а при дальнейшем повышении температуры I РМУ уменьшается. В интервале температур 20–300 °С зависимости полностью обратимы. На этих кривых отчетливо выражен излом при 150–160 °С, который, по-видимому, соответствует температуре, при которой происходит размораживание движения молекул или их частей. В случае использования в качестве наполнителя каолина, такой излом также имеет место, но и при более высокой температуре (200 °С), тогда как в случае Cr_2O_3 эти эффекты становятся менее отчетливыми, либо не наблюдаются в зависимости от концентрации Cr_2O_3 .

Уменьшение I МУРР полимером при высоких температурах выше 400 °С можно связать с процессами его деструкции.

В присутствии наполнителей (оксида хрома и каолина) температура начала процессов структурирования ПДМФС понижается. Эта температура зависит от вида и количества наполнителя.

В случае полимера, содержащего каолин, появляется заметное дополнительное рассеяние во всем интервале углов рассеяния, которое не может быть связано с рассеянием поверхностью раздела полимер-каолин. Это означает, что в образце появляется в большом количестве областей неоднородности. Радиусы этих областей примерно равны 6–7 Å.

Структурные превращения, исследованные методами рентгеновского рассеяния под малыми и большими углами, и термический анализ полисилоксанов различного состава

И. Б. Глебова, В. В. Голубков, В. Л. Уголков

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия

Одним из важнейших свойств органосиликатных материалов является их термостойкость. В связи с этим представляет интерес проследить структурные превращения методами рентгеновского рассеяния под малыми (МУРР) и большими углами (БУРР) полиорганосилоксанов с разными боковыми группами (метильными, фенильными, а также метильными и фенильными одновременно) в температурном интервале 20–600 °С и термические свойства при нагреве до 1000 °С.

На кривых рассеяния при комнатной температуре наблюдается повышение интенсивности (I) МУРР в сторону нулевого угла рассеяния от полимеров, содержащих только фенильные группы к полимерам, содержащим смешанные группы, и существенное для полимеров, содержащих только метильные группы. При более высоких температурах вплоть до температур начала интенсивной деструкции полимеров интенсивность I МУРР при больших углах уменьшается, а при малых увеличивается. Такое изменение угловой зависимости интенсивности МУРР можно объяснить появлением значительного количества областей неоднородности. При дальнейшем повышении температуры I РМУ уменьшается. В интервале температур от 20 °С до 250–300 °С зависимости I РМУ полностью обратимы.

Дифракционные кривые рассеяния под большими углами свидетельствуют об аморфной структуре всех указанных выше полимеров. На этих кривых наблюдается одно или два аморфных гало в зависимости от строения полимера: дифракционные кривые полидиметилсилоксана (ПДМС) содержат один дифракционный максимум. Для остальных образцов наблюдается два максимума. Смещение положения первого максимума аморфного гало при разных температурах отжига показывает разное изменение плотности полимерной матрицы в зависимости от строения: уплотнение в области температур 20–250 °С, разрыхление их структуры в области интенсивной деструкции полимеров и далее вновь уплотнение. Характер деструктивных превращений совершенно разный для полифенилсилоксана (ПФС) и ПДМС: окислительная деструкция ПДМС проходит в гораздо меньшем интервале температур с одним этапом потери массы и большей потерей массы, чем окислительная деструкция ПФС, которая протекает в широком интервале температур в три этапа. ПФС является более термостойким полимером, чем ПДМС.

Темплатное электроосаждение одномерных наноструктур железа

А. С. Гончарова, С. В. Сотничук, А. С. Семисалова, К. С. Напольский

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

Ферромагнитные материалы, проявляющие анизотропию функциональных свойств, представляют большой интерес при создании различных устройств и их отдельных компонентов в области микроэлектроники и микрофлюидики. Например, при формировании микропловцов – анизотропных наноструктур способных направленно передвигаться в жидкости – в качестве магнитного материала широко применяются никель, кобальт и сплавы на их основе. Также нанонити с ферромагнитными прослойками могут быть использованы при создании SFS-контактов. Большое внимание исследователей всего мира привлекают наноструктуры на основе железа, так как оно обладает максимальным магнитным моментом среди 3d металлов.

Целью данной работы является создание наноструктур на основе железа методом темплатного электроосаждения и выявление факторов, определяющих их магнитные свойства.

Для формирования нанонитей железа был применен метод темплатного электроосаждения. В качестве матриц использовали пленки анодного оксида алюминия (АОА) с высокоупорядоченной пористой структурой, полученные анодированием в 0,3 М растворе щавелевой кислоты при 40 В. Электрокристаллизацию железа в каналах АОА проводили при комнатной температуре в трехэлектродной ячейке из раствора следующего состава: FeSO_4 (0,5 М), Na_2SO_4 (0,5 М), H_3BO_3 (0,4 М), аскорбиновая кислота (0,006 М). Рабочим электродом служила пористая пленка АОА, на одну сторону которой был напылен слой золота, в качестве вспомогательного электрода использовали платиновую проволоку. Электродом сравнения выступал насыщенный Ag/AgCl электрод ($E_{\text{Ag}/\text{AgCl}} = 0,197$ В отн. н.в.э.).

В ходе работы при различных потенциалах осаждения были получены сильно анизотропные (фактор анизотропии ~ 300 – 400) наноструктуры железа с диаметром 55 ± 5 нм и длиной от 20 до 30 микрон. Показано, что наиболее рациональные значения потенциала осаждения железа из используемого электролита лежат в диапазоне от $-0,9$ до $-1,0$ В относительно Ag/AgCl . В данных условиях наблюдается равномерный фронт роста металла. Результаты рентгенофазового анализа свидетельствуют о формировании фазы α -Fe. Полученные композиты Fe нанонити/АОА проявляют анизотропию магнитных свойств.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-13-00809.

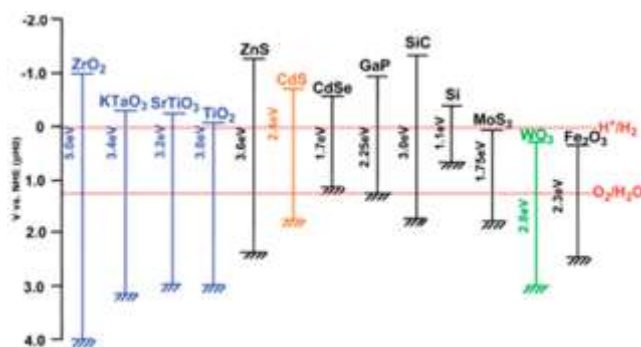
Фотоиндуцированное изменение гидрофильности поверхности гетероструктурных покрытий ZnO/TiO₂, CdS/TiO₂, WO₃/TiO₂

А. Е. Гришина, У. Г. Опаричева, М. В. Маевская, А. В. Рудакова, А. В. Емелин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Интерес к исследованиям гидрофильных/гидрофобных свойств поверхности связан с широким практическим применением самоочищающихся покрытий, действие которых основано на эффекте фотоиндуцированной супергидрофильности. Гидрофильность поверхности оценивается по величине угла смачивания воды. Если контактный угол меньше 5°, то такая поверхность называется супергидрофильной. Сам же эффект заключается в переходе поверхности оксидов металлов в супергидрофильное состояние под действием УФ света. Диоксид титана – самый исследуемый среди фотоактивных материалов, поверхность которого переходит в супергидрофильное состояние.

Несмотря на широкое практическое применение, механизм эффекта до сих пор не понят. Предполагается, что при облучении происходит переход поверхности в супергидрофильное состояние в результате перестройки гидратного покрова при захвате фотоносителей. Для того чтобы понять, какие именно носители зарядов играют ключевую роль в этом процессе, целью работы являлось создание гетероструктур, в которых эффективно происходит разделение зарядов. Это возможно из-за различного энергетического расположения запрещенных зон у компонентов структуры (рис.).



*Энергетическая схема
расположения запрещенных зон
некоторых полупроводников*

В данной работе исследовались следующие гетероструктуры: ZnO/TiO₂, CdS/TiO₂ и WO₃/TiO₂. В случае с CdS/TiO₂ при освещении светом образцов происходит концентрация электронов на поверхности диоксида титана, для гетероструктур ZnO/TiO₂, WO₃/TiO₂ – дырок. Анализ полученных данных поможет понять, какие именно носители заряда играют преобладающее значение в процессе фотоиндуцированной супергидрофильности для диоксида титана.

Исследование было профинансировано грантом Правительства Российской Федерации для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях, подведомственных Федеральному агентству научных организаций, и государственных научных центрах Российской Федерации № 14.Z50.31.0016.

Наноразмерные силикатные пленки, допированные частицами Pt и Pt/Pd

*Н. Н. Губанова^{1,2}, О. А. Шилова², В. А. Матвеев¹,
А. Г. Иванова², О. А. Загребельный²*

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

² *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Одними из наиболее эффективных катализаторов по-прежнему остаются платина и палладий, наряду с этим они являются достаточно дорогими материалами. Поэтому весьма актуальным является поиск путей решения проблемы путем снижения стоимости материала катализатора. Один из вариантов – уменьшение количества благородного металла и равномерное его распределение в матрице в виде наночастиц [1].

В качестве прекурсора, формирующего кремнеземную сетку, использовали тетраэтоксисилан, а легирующих компонентов – гексахлорплатиновую кислоту и хлорид палладия (II). Золи наносили методом центрифугирования, а затем пленки фиксировали при температуре 250 °С.

Для изучения структуры пленок использовали различные взаимодополняющие методы исследования. Толщину пленок и характер распределения в них наночастиц Pt и Pd определяли с помощью рентгеновского рефлектометра (модифицированный рентгеновский дифрактометр ДРОН-3, ПИЯФ, Гатчина) со спектральной линией $\text{Cu}_{K\alpha} = 0,154$ нм, структуру пленок и морфологию поверхности – методом атомно-силовой микроскопии (микроскоп Solver NT-MDT) и с помощью сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии (приборная база ресурсного центра СПбГУ), каталитическую активность наночастиц оценивали по вольтамперометрическим характеристикам.

Комплексный анализ экспериментальных данных позволил выявить специфическую структуру силикатных пленок, особенно с высоким содержанием легирующих соединений Pt и Pd, и подобрать оптимальные условия золь-гель синтеза.

1. Шилова О.А., Губанова Н.Н., Матвеев В.А., Байрамуков В.Ю., Кобзев А.П. Состав, структура и морфология поверхности наноразмерных платиносодержащих пленок, получаемых из золь // Физика и химия стекла. 2016. Т.42. № 1. с.108-118.

The study of BaTiO₃ nanoparticles effect on threshold properties of Liquid Crystal 5CB

Sh. A. Humbatov¹, M. A. Ramazanov¹, A. R. İmamaliyev²

¹ Department of Chemical Physics of Nanomaterials, Faculty of Physics, Baku State University, Azerbaijan

² Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Science, Baku, Azerbaijan

Liquid crystals due to their uncial features and properties have wide application in various fields, namely, device manufacturing areas. Based on this technology we now have low-weight light modulator due to fast electro optic effect occurring in liquid crystals. One way to achieve such improvement is the synthesis of liquid crystals materials with enhanced parameters. The other way is to combine the properties of liquid crystals with other functional materials in a constructive way. By using the volt-farad characteristics the influence of BaTiO₃ nanoparticles on the threshold voltage of the planar-hometrop transition in nematic liquid crystal 4-pentil 4-cyanobiphenyl (5CB) has been studied. It was believed that when the BaTiO₃ nanoparticles are added to 5CB the planar-hometrop transition appears in two stages: at $U_{th1} = 0,4V$ the weak transition and at $U_{th2} = 2V$ the strong transition takes place. Besides the decreasing of capacitance of the cell with liquid crystal dopped by BaTiO₃ nanoparticles is observed at voltages exceeding 6 V.

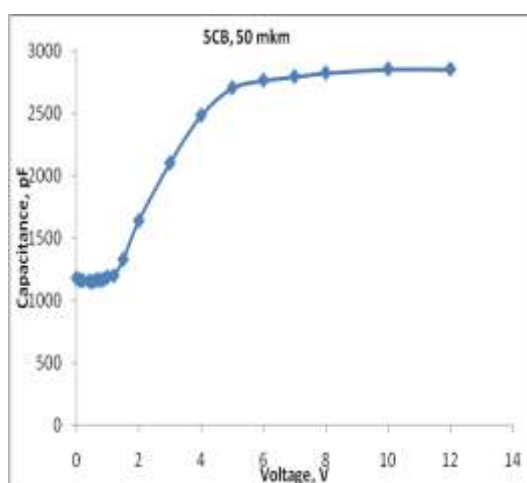


Fig. 1. Volt-farad characteristics of electrooptic cell containg 5CB

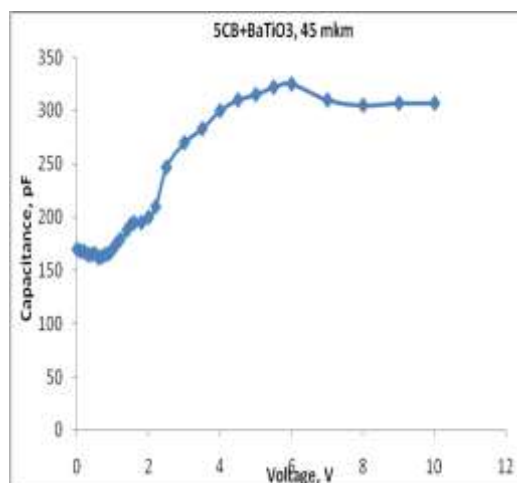


Fig. 2. Volt-farad characteristics of electrooptic cell containg 5CB+BaTiO₃

1. T. D. Ibragimov, A. R. İmamaliyev, G. M. Bayramov. – Formation of local electric fields in the ferroelectric particles Liquid Crystal Colloids, 15th Intenational conference on FLCC Prague, Czech Republic, 2015, 28 July, p. 120.

2. Yuriy Reznikov - Ferroelectric Colloids in Liquid Crystals, Liquid crystals Beyond Displays: Chemistry, Physics, and Applications, Edited by Quan Li, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2012, 573 p.

Ультразвуковое исследование молекулярного P_2O_5 под давлением

И. В. Данилов^{1,2}, Е. Л. Громницкая¹, А. Г. Ляпин^{1,2}, В. В. Бражкин^{1,2}

¹ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия*

Твердые фазы оксида фосфора P_2O_5 под давлением практически не исследовались из-за рекордной гигроскопичности. При обычных условиях P_2O_5 существует в гексагональной форме ($h-P_2O_5$) [1, 2], однако, P - T фазовая диаграмма до сих пор имеет много неопределенностей. В нашей работе проводились исследования ультразвуковым методом продольной и поперечной скоростей звука, а также определение изменения объема под давлением оксида фосфора при различных температурах и в режиме естественного отогрева установки от $T = 77$ К до 295 К.

Исследования проводились на ультразвуковом пьезометре до давлений 2 ГПа. Из-за высокой гигроскопичности исследуемого материала образцы препарировались в аргоновом боксе. Порошкообразный P_2O_5 предварительно обдавлялся и помещался в цилиндрическую дюралевую капсулу (диаметр 16 мм, высота образца 7–8 мм). Импульсным ультразвуковым методом измерялись времена пробега продольной и поперечной звуковой волны на частотах 10 МГц и 5 МГц.

Экспериментальные зависимости ультразвуковых скоростей и относительного изменения объема при $T = 295$ К выявили обратимый фазовый переход из гексагональной фазы в новую фазу: $P = 0,4$ ГПа при повышении давления и $P = 0,13$ ГПа при снятии давления, скачек объема при этом переходе $\sim 7,5$ %, что хорошо коррелирует с данными работы [1]. При переходе в новую фазу наблюдается увеличение обеих скоростей, что приводит к росту модуля объемной упругости и модуля сдвига для P_2O_5 . Измерения, проведенные при температуре жидкого азота, выявили фазовый переход по изменениям скоростей ультразвука при повышении давления ($P = 0,48$ ГПа), причем по изменению объема этот переход был выражен неявно. Снятие давления показало необратимость экспериментальных зависимостей и метастабильность новой фазы, что прогнозировалось в работе [1]. Эксперименты в режиме естественного отогрева ($T = 77$ – 295 К) при малых давлениях (0,03–0,1 ГПа) показали, что при $T > 200$ К наблюдается фазовый переход с возвратом к исходным значениям скоростей и объема.

1. Johns I.B., Ulmer H.E., Edwards J.W., J. Chem. Phys. 1271, 35 (1961).

2. Jung I.-H., Hudon P. J. Am. Ceram. Soc. 3665, 95 (2012).

Синтез и исследование оксидных электролитных материалов на основе диоксида церия

Т. Л. Егорова¹, М. В. Калинина¹, Г. П. Копица^{1,2}, О. А. Шилова

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

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

Основными способами получения керамических нанопорошков на основе редкоземельных элементов являются разные варианты химических методов, поэтому роль управляемого синтеза в формировании и модифицировании их свойств становится определяющей. Именно на стадии формирования закладываются размерные, фазовые, структурные характеристики, а следовательно, химические, физические и механические свойства керамических материалов. Поэтому особенно важно выявить зависимости между условиями синтеза, составом и свойствами получаемых материалов. Для установления этих корреляционных связей используется целый ряд взаимодополняющих методов исследования, в том числе с использованием малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН).

Целью данной работы является разработка технологических основ направленного жидкофазного синтеза на базе методов совместного осаждения гидроксидов и совместной кристаллизации солей для получения ксерогелей, нанодисперсных порошков заданного химического состава в системе $\text{CeO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$, являющихся основой для создания электролитных материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ).

Выявлено, что нанопорошки, синтезированные методом совместного осаждения и обожженные при 600 °С, обладают кубической кристаллической структурой типа флюорита с параметром решетки $a = 5,38 \text{ \AA}$ и размером кристаллитов $\sim 12 \text{ нм}$. Нанопорошки, полученные методом совместной кристаллизации, обладают идентичной кристаллической структурой с размером кристаллитов $\sim 20 \text{ нм}$.

Исследования мезоструктуры нанопорошков методом МУРН проведены для CeO_2 . Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора плотности амплитуды рассеяния, определены характерные размеры рассеивающих неоднородностей и их удельные поверхности для каждого из использованных методов синтеза нанопорошков.

На основе полученных высокодисперсных порошков получены электролитные материалы для среднетемпературных ТОТЭ с повышенной эффективностью и увеличенным ресурсом работы.

Микроструктура и свойства коллоидных растворов на основе магнитотвердых наночастиц гексаферритов

А. А. Елисеев, А. В. Васильев, Л. А. Трусов, Е. А. Анохин, П. Е. Казин

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

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа ($MFe_{12}O_{19}$, где $M = Ba, Sr$) 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 c [1]. 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. Влияние последнего фактора так же приводит к формированию дисперсной фазой нитевидных динамических структур в магнитном поле.

Таким образом, целью настоящей работы является установление зависимости между структурой дисперсной фазы раствора и его магнитными и оптическими свойствами.

Получение коллоидного раствора осуществлялось по разработанной ранее методике растворения боратной стеклокерамики [2]. Преимуществом данного метода является изначальное разделение частиц в структуре стеклокерамики, что позволяет формировать коллоидные растворы непосредственно на этапе выделения наночастиц. Полученные в ходе работы растворы обладали магнитооптической активностью и проявляли склонность к образованию динамических агрегатов, оседающих со временем. Структура дисперсной фазы под воздействием внешнего магнитного поля была исследована на основании оптического отклика системы и данных малоуглового рентгеновского рассеяния. Установлено образование нитевидных динамических агрегатов со средним расстоянием между наночастицами гексаферрита около 30 нм.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-03-01052.

1. Pullar R.C., Progress in Materials Science, 1191, 57(7) (2012).
2. L.A. Trusov, A.V. Vasiliev, M.R. Lukatskaya, D.D. Zaytsev, M. Jansen, P.E. Kazin, Chemical Communications, 14581, 50 (2014).

Синтез и свойства композитных аэрогелей SiO₂-TiO₂

Х. Э. Ёров¹, А. Е. Баранчиков²

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия*

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

Аэрогели представляют собой уникальные материалы, характеризующиеся высокой пористостью и удельной поверхностью, низкой плотностью и теплопроводностью. Особый интерес вызывает возможность получения композитов, сочетающих эти характеристики с высокой каталитической активностью. В качестве подобных систем предложено использовать смешанные аэрогели на основе SiO₂-TiO₂, которые могут выступать в качестве катализаторов (изомеризации и эпоксицирования алкенов) и фотокатализаторов (фотоиндуцированное разложение органических загрязнений воды и воздуха).

Целью настоящей работы являлась разработка методов получения смешанных аэрогелей SiO₂-TiO₂ с использованием новых сверхкритических сред (полифторированных спиртов и простых эфиров).

Смешанные аэрогели на основе SiO₂-TiO₂, содержащие 0–50 мольн. % TiO₂, были синтезированы золь-гель методом с использованием тетраметоксисилана и тетраизопророксида титана. Сушку лиогелей проводили с использованием в качестве сверхкритических флюидов (СКФ) изопропанола (*i*-PrOH), CO₂, метил-*трет*-бутилового эфира (МТБЭ) и гексафторизопропанола (ГФИП).

Все полученные бинарные аэрогели SiO₂-TiO₂ характеризовались высокой удельной площадью поверхности (200–1200 м²/г). Вне зависимости от используемого сверхкритического флюида микроструктура аэрогелей SiO₂-TiO₂ характеризуются отсутствием крупных мезопор (диаметром более 20 нм), и существенный вклад в высокую удельную площадь поверхности аэрогелей вносят микропоры, в особенности при проведении сушки в CO₂. Использование СКФ с относительно низкой критической температурой (ГФИП, $t_{\text{крит.}} = 182$ °С и CO₂, $t_{\text{крит.}} = 31$ °С) привело к получению рентгеноаморфных аэрогелей. С другой стороны, при использовании *i*-PrOH ($t_{\text{крит.}} = 235$ С) и МТБЭ ($t_{\text{крит.}} = 224$ С) аэрогели содержали нанокристаллический анатаз (размер частиц 10–20 нм). Показано, что текстурные характеристики и микроструктура полученных аэрогелей практически не изменяются при их термической обработке до температур ~ 600 °С. Смешанные аэрогели показали заметную фотокаталитическую активность (сравнимую с коммерческим фотокатализатором AEROXIDE® TiO₂ P 25) в процессах фотодеградациии органических красителей.

Работа выполнена при поддержке РФФ (14-13-01150).

1. S.A. Lermontov, N.A. Sipyagina, A.N. Malkova, A.E. Baranchikov, Kh.E. Erov, D.I. Petukhov, V.K. Ivanov., Russian Journal of Inorganic Chemistry, 549, 60 (2015).

2. Kh.E. Yorov, N.A. Sipyagina, A.N. Malkova, A.E. Baranchikov, S.A. Lermontov, L.P. Borilo, V.K. Ivanov., J. Inorg. Mater. 197, 52 (2016).

Проводимость новых многослойных структур в различных газовых средах

*О. В. Жилова, И. В. Бабкина, Т. И. Епрынцева,
А. В. Ситников, П. М. Хлоповских*

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Полупроводниковые пленки были получены методом ионно-лучевого распыления мишеней оксидов цинка (ZnO) и индия (In_2O_3) на ситаловые подложки, закрепленные на вращающемся держателе. В случае многослойной структуры, одновременно распылялись две мишени.

Для проведения исследований сенсорных свойств, полученные структуры поочередно нагревались и охлаждались в атмосферах воздуха и воздуха с водородом. В качестве примера на рис. 1 приведены температурные зависимости сопротивления In_2O_3 в различных газовых средах.

Предварительно пленки ZnO, In_2O_3 , $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$ отжигались в вакууме $1 \cdot 10^{-4}$ Торр при 600°C в течение 30 минут и охлаждались до комнатной температуры. Затем в камеру напускался воздух давлением 380 Торр и пленки нагревались до 400°C . Время выдержки образцов при данной температуре выбиралось исходя из скорости изменения сопротивления $(R) - dR/dt \approx 0$. После отжига при данных условиях происходило остывание пленок до комнатной температуры (кривая 1, рис. 1), потом в камеру с воздушной средой добавлялся водород при давлении 2,4 Торр и образцы опять нагревались до 400°C (кривая 2, рис. 1). Затем пленки остывали до комнатной температуры (кривая 3, рис. 1). На последнем этапе из камеры откачивалась водородосодержащая среда, напускался воздух давлением 380 Торр и происходил нагрев до 400°C (кривая 4, рис. 1).

В течение всех термических воздействий регистрировалось сопротивление образца.

Исходя из данных рисунка 1, результирующая характеристика адсорбции $\Delta R/R = (R(T)_1 - R(T)_2)/R(T)_2$ и десорбции $\Delta R/R = (R(T)_4 - R(T)_3)/R(T)_3$ водорода для пленок In_2O_3 представлена на рис. 2. Из рисунка видно, что эти процессы происходят при разных температурах, а, следовательно, имеют разную энергию активации.

По такой же методике были исследованы пленки ZnO и $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$.

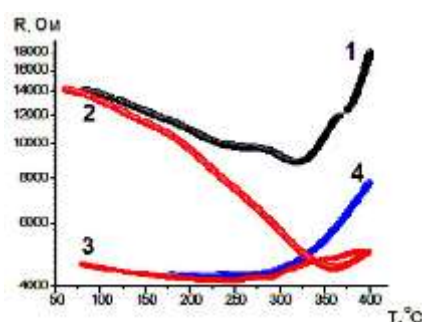


Рис. 1. Температурные зависимости полупроводниковых пленок In_2O_3 , толщиной $0,05 \mu\text{m}$, в атмосфере воздуха (кривые 1, 4) и атмосфере воздуха и водорода (кривые 2, 3)

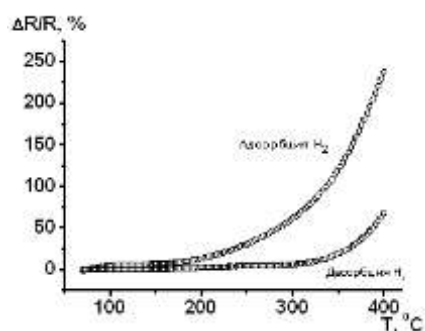


Рис. 2. Газовая чувствительность пленок In_2O_3 при адсорбции и десорбции водорода

Влияние ближнего и дальнего порядка на фотолюминесценцию ионов Eu^{3+} и Tb^{3+} в полимер-неорганических нанокompозитах

*А. Ю. Завьялова¹, Р. Ю. Смыслов², Т. Д. Ананьева², Г. П. Копица³,
К. В. Ездакова³, А. К. Хрипунов², А. А. Ткаченко⁴, А. Н. Бугров^{1, 2}*

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

² Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

⁴ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Полимер-неорганические нанокompозиты (ПНК) на основе полиметилметакрилата (ПММА) и бактериальной целлюлозы (БЦ), включающие в свой состав ионы лантанидов (Ln^{3+}), в свете современных требований к материалам могут найти применение в оптоэлектронике и медицине в качестве пленочных волноводов, светодиодов, костных цементов и имплантатов. В таких системах Ln^{3+} либо локализованы в структуре полимерной матрицы, либо в неорганическом наполнителе. В зависимости от окружения Ln^{3+} : природы органического лиганда, типа кристаллической решетки наночастиц (НЧ) меняется характер спектров возбуждения фотолюминесценции иона, что позволяет исследовать надмолекулярную структуру формирующихся ПНК и визуализировать ее изменение во времени с помощью спектроскопических методов.

В данной работе изучена взаимосвязь фотолюминесцентных свойств и структуры ПНК на основе ПММА с НЧ твердых растворов $\text{ZrO}_2\text{-Ln}_2\text{O}_3$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Tb}$) и БЦ, включающей наряду с диоксидом циркония ионы Tb^{3+} как в составе $\text{TbCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, так и металл-полимерного комплекса (МПК). Анализ данных люминесцентной спектроскопии (ЛС) наночастиц $\text{ZrO}_2\text{-Ln}_2\text{O}_3$ позволил зафиксировать квазилинейчатую полосу в видимой области, характерную для Ln^{3+} . Стабилизация тетрагональной полиморфной модификации ZrO_2 за счет введения 10 мол% Ln_2O_3 привела к уменьшению интенсивности люминесценции НЧ. Изменение симметрии кристаллического поля ZrO_2 также способствовало расщеплению спектрального термина европия ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ при 606 и 614 нм. Поверхностная модификация НЧ кремнийорганическими соединениями и введение НЧ в ПММА способствовали увеличению поглощающей способности НЧ и эффективному переносу энергии электронного возбуждения (ПЭВ) с этой связи на Ln^{3+} .

Эффективность люминесценции ПНК на основе БЦ, содержащей в качестве люминофоров МПК Tb^{3+} с сополимером винилпирролидона, содержащим 12 мол. % звеньев метакрилоил-орто-аминобензойной кислоты, оказалась на порядок выше, чем в случае использования $\text{TbCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Установлено, что введение НЧ ZrO_2 в матрицу БЦ способствует усилению внутреннего отражения света в ПНК и более полному ПЭВ на Tb^{3+} . Сочетание методов МУРР, МУРН, СЭМУРН и ЛС позволило провести корреляции между структурой и люминесцентными свойствами ПНК.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-02-00987.

Влияние геометрии шаблона на кристаллическую структуру Ni-нанотрубок

М. Ибрагимова, А. Козловский, К. К. Кадыржанов

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

В последние годы растет интерес к упорядоченным искусственным магнитным наноструктурам обусловленный не только желанием понять фундаментальные свойства этих материалов, но и разнообразие их возможных применений. Такие приложения варьируются от магнитной записи до датчиков и биомagnetизма. Среди различных исследованных материалов, наноструктуры на основе Ni являются привлекательными из-за их превосходных магнитных свойств, высоким уровнем намагниченности. Одномерные наноструктуры могут быть получены с помощью различных методик, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия, нанолитография и электрохимическое осаждение.

В данной работе рассмотрено влияние диаметра пор шаблонных матриц на формирование кристаллической структуры Ni – нанотрубок, полученных методом электрохимического осаждения. В качестве шаблонов использовались трековые мембраны на основе ПЭТФ толщиной 12 мкм, облученные на ускорителе тяжелых ионов ДЦ – 60, с диаметрами от 180 до 380 нм. Для изучения характеристик полученных Ni нанотрубок были использованы методы РЭМ, ЭДА, РСА.

Рентгеноструктурный анализ показал, что исследуемые образцы обладают поликристаллической структурой с ГЦК фазой, при этом параметры кристаллической решетки отличаются от эталонных значений, что свидетельствует о наличии в структуре микроискажений и микронапряжений кристаллической решетки. Согласно РСА анализу полученных образцов, было определено, что с увеличением диаметра пор и, следовательно, осаждаемого объема, на дифрактограммах наблюдается увеличение интенсивности пика (200), при этом также происходит изменение геометрии пика (111) в сторону асимметрии, что может быть обусловлено наличием примесей в кристаллической структуре. Снижение интенсивности пика (111) обусловлено уменьшением размеров блоков когерентного рассеяния рентгеновских лучей (размер кристаллитов), ориентированных в этом направлении. в то время как увеличение интенсивности пика (200) обусловлено снижением степени микронапряжений в кристаллической структуре и увеличению размеров кристаллитов ориентированных в направлении [200]. Расчет текстурных коэффициентов согласно уравнению Харриса также подтверждает предположение о переориентации кристаллической структуры с увеличением геометрических параметров шаблонных матриц и выделению текстуры в направлении [200]. Также можно сделать предположение о влиянии толщины стенок на изменение кристаллической структуры. С увеличением диаметра пор, поперечный процесс роста структуры начинает преобладать над продольным ростом за счет увеличения осаждаемого объема. В этом случае тангенциальный рост кристаллитов начинает преобладать над ростом в направлении нормали за счет образования многослойной структуры роста нанотрубок.

First crystal structure of a bis-coupler azo pigment determined from X-ray powder diffraction data

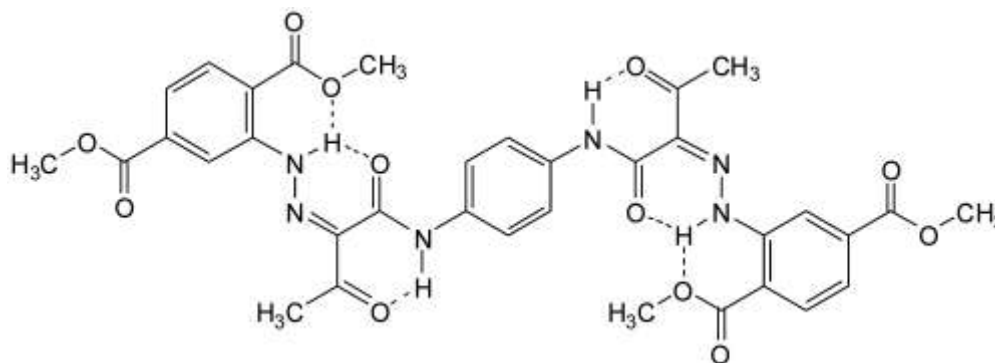
S. N. Ivashevskaya¹, J. van de Streek², J. Brüning³, M. U. Schmidt²

¹ Institute of Geology Karelian Research Centre RAS, Petrozavodsk, Russia

² Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität, Frankfurt, Germany

³ Merck KGaA, Darmstadt, Germany

For the colouration of plastics, lacquers, coatings and printings inks, azo-pigments are widely used nowadays. The most important bis-coupler azo pigment is P.Y. 155. It provides a clean, greenish yellow shade and shows a good solvent resistance. As a result, single crystals of P.Y. 155 (and other bis-coupler pigments) could not be grown. Consequently, the crystal structure was determined from laboratory X-ray powder diffraction data Cu- $K\alpha_1$ radiation ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) was used.



Scheme 1. Pigment Yellow 155

The crystal structure was solved in real space by simulated annealing using the program *DASH*. The initial molecular geometry was constructed from crystal data of mono-azo pigments, and the intramolecular degrees of freedom (rotations around single bonds) were treated as variable. After structure solution, the crystal structure was refined by the Rietveld method with the program *TOPAS*. Restraints were used for all bond lengths, bond angles and planar groups.

As an independent check of the correctness of the crystal structure, the structure was energy-minimised with a dispersion-corrected Density Functional Theory (DFT-D) method that has been proven to be able to reproduce experimental single crystal structures of small organic molecules very accurately.

In the crystal structure of P.Y. 155, molecules are planar and form a layer packing. Within the layers, the molecules fill the space almost completely. The layers are closely packed. The high density and the strong intermolecular interactions result in a very low solubility and good fastness properties.

The supplementary crystallographic data (CCDC 832898) can be obtained from the Cambridge Crystallographic Data Centre via www.ccdc.cam.ac.uk/data_request/cif.

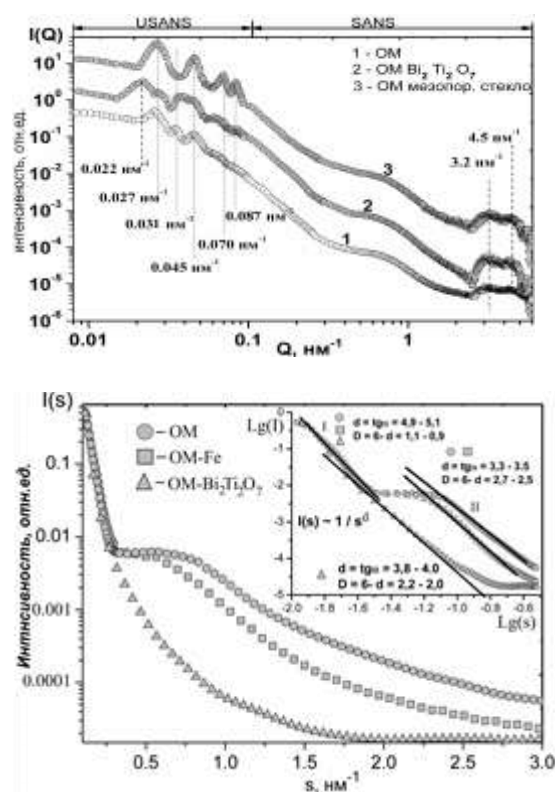
Изменение структуры 3D-упорядоченных нанокомпозитов на основе опаловых матриц от материала заполнения пустот по данным МУРР и МУРН

С. Н. Ивичева¹, С. В. Амарантов²

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

² *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия*

Методами малоуглового рентгеновского рассеяния и нейтронов исследована внутренняя структура трехмерных упорядоченных нанокомпозитов на основе опаловых матриц в зависимости от материала наполнения пустот опаловой матрицы (ОМ). Анализ данных МУР и математического моделирования показал, что опалоподобные структуры обладают несколькими системами рассеивающих неоднородностей. В области переданных импульсов соизмеримых с параметрами структуры трехмерных нанокомпозитов на основе ОМ можно наблюдать дифракционные рефлексы, соответствующие ГЦК структуре, а также появлению или исчезновению рефлексов в зависимости от состава композита, не свойственных идеальной ГЦК-решетке, что может быть связано с наложением рефлексов от подрешетки наполнителя. В областях Q 0,1–0,3 и > 1 нм^{-1} два диапазона, в которых поведение кривых рассеяния подчиняется степенным законам, наличие характеристических наклонов которых, говорит о наличии в каждом образце еще, по меньшей мере, двух рассеивающих подсистем, причем вторая подсистема обладает свойствами поверхностного фрактала, поскольку для неё выполняется условие: $3 < d < 4$. Для $0,1 < Q < 0,3$ кривая рассеяния может быть охарактеризована одним, причем характерным для всех композитов, размером, вероятно, соизмеримым со средневзвешенным размером пор. По данным МУР и математическому моделированию была произведена оценка структурных параметров композитов на основе ОМ в зависимости от заполнения порового пространства различными материалами.



Авторы выражают признательность А. С. Иванову (ILL, Гренобль).

Магнитоэлектрический эффект в композиционных материалах $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3-CoFe_2O_4$

Д. А. Калганов, И. А. Глушко, А. А. Федий, И. В. Бычков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

В магнитоэлектрических (МЭ) материалах возможно изменение электрической поляризации при воздействии внешнего магнитного поля и индуцирование намагниченности при воздействии на материал внешнего электрического поля. Поиск и исследования таких материалов в последние годы направлен на практическое приложение их свойств – создание нового типа устройств электроники. Класс однофазных МЭ материалов – мультиферроиков достаточно широк, однако в большинстве из них требуемые свойства проявляются при низких температурах и малы вследствие низкой связанности магнитной и электрической подсистем. Значительно большим в сравнении с мультиферроиками магнитоэлектрическим коэффициентом обладают магнитострикционно-пьезоэлектрические композиционные материалы.

В работе были получены композиционные материалы на основе керамики титаната бария-стронция $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$ и феррита кобальта $CoFe_2O_4$ с объёмной долей последнего от 10 до 90 процентов. Рентгенофазовый анализ образцов материалов показал, что в состав полученного композита исходные фазы входят без изменения и без образования новых соединений, интенсивность рентгеновских максимумов при этом соответствует объёмной доле компонентов многофазной системы. Максимальное значение магнитоэлектрического коэффициента по напряжению $a_E = E/H$ у исследуемых материалов получено для состава с 20 объёмными процентами феррита кобальта ($a_E = 32$ мВ/А), при поперечном направлении внешнего магнитного поля, что может быть объяснено эффектом пьезоэлектрического резонанса. Выявлена сильная зависимость a_E исследуемых материалов от плотности керамики и размера кристаллитов фаз.

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «УМНИК» (договор №0018610).

Шаблоны аморфного диоксида кремния с заданными параметрами пор

Е. Ю. Каниуков, Д. В. Якимчук

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

В работе продемонстрирован простой способ формирования шаблонов аморфного диоксида кремния с диаметрами пор от 100 нанометров до нескольких микрон с применением ионно-трековой технологии. Проведены исследования зависимости характеристик, как отдельной поры, так и всего шаблона в целом, от времени травления, концентрации плавиковой кислоты, типа ионов и флюенса облучения. Показана линейность зависимости размеров пор от времени травления и концентрации плавиковой кислоты. Определены условия наступления порога перколяции верхних диаметров пор в зависимости от времени травления и флюенса облучения. Установлено, что тип облучающих ионов при больших энергиях облучения не влияет на параметры пор. В дополнение к известным ранее порогам травления в зависимости от энергии электронных потерь [1, 2], предложено новое значение порога $(dE/dx)_e > 16 \text{ кэВ}\cdot\text{нм}^{-1}$, при котором диаметры получаемых в результате травления пор не зависят от неупругих потерь.

Сформулированы общие рекомендации по созданию шаблонов $\alpha\text{-SiO}_2$ на кремниевой подложке с точки зрения их последующего применения. Описаны необходимые параметры облучения и травления для получения отдельностоящих конических пор одинакового диаметра, открытых пор с диаметрами менее 100 нм и более 1000 нм; пор с различными диаметрами и степенью конусности на одной подложке; а также пор со взаимным перекрытием или на пороге перколяции. Даны общие рекомендации по их возможному практическому применению, а также предложены конкретные использования шаблонов для создания сенсоров магнитного поля [3] и высокочувствительных биодатчиков [4].

Исследование выполнено при поддержке проекта БРФФИ № Ф15СО-016.

1. A. Dallanora, T. L. Marcondes et al. J. Appl. Phys. B 104, 024307 (2008).
2. J. Jensen, A. Raspel et al. Nucl. Instr. Meth. B 243, 119 (2006).
3. S. E. Demyanov, E. Yu. Kaniukov et al. Sens. Actuators A 216, 64 (2014).
4. V. A. Sivakov, E. Yu. Kaniukov et al. J. Cryst. Grow., 400, 21 (2014).

**Исследование химического состава, структуры,
механических свойств тонких углеродных пленок на армко-железе
до и после бомбардировки ионами аргона**

*Т. С. Картапова, Ф. З. Гильмутдинов, В. Л. Воробьев,
О. Р. Бакиева, В. Я. Баянкин*

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Поверхность определяет практически важные физико-химические и механические свойства материалов: коррозионную стойкость, катализ, адсорбцию, электрические свойства, жаропрочность, механическую прочность и др. Рядом полезных функциональных свойств обладают наноразмерные углеродные, графитно-карбидные слои и пленки на металлических поверхностях. Перспективными методами их создания являются методы ионно-лучевой, ионно-плазменной, лазерной обработки и магнетронного напыления.

В данной работе исследованы градиентные по составу и структуре тонкие (30–40 нм) углеродные покрытия на поверхности армко-железа, полученные комбинированным методом магнетронного напыления с последующим перемешиванием потоком высокоэнергетичных ионов аргона.

На основании РФЭС и EELFS данных можно утверждать, что при магнетронном напылении формируется углеродное покрытие переменного состава и структуры. Поверхностные слои представляют собой структуру разупорядоченного углерода, а в переходной зоне возможно образование нестехиометрических карбидов железа. Последующая ионная бомбардировка приводит к еще большему разупорядочению углеродного слоя вплоть до аморфизации, при этом на границе раздела нестехиометрические карбиды железа становятся основной составляющей.

По данным спектроскопии комбинационного рассеяния, при магнетронном напылении изначально формируется пленка со структурой разупорядоченного углерода с sp^2 гибридизацией. При последующей ионной бомбардировке степень разупорядочения возрастает. Особенности спектров КР в области T-полосы (1100 см^{-1}) позволяют утверждать об аморфизации углеродного слоя.

Методом РСА выявлено образование структурных неоднородностей и образование структуры цементита в переходной области «пленка-металл». Рефлексы структуры графита на дифрактограммах не обнаружены.

Твердость тонких (~ 70 нм) поверхностных слоев армко-железа с углеродным покрытием до и после облучения превышает соответствующее значение для исходного образца армко-железа на 30 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта №9302ГУ/2015.

**Влияние предварительной имплантации ионов Ag^+
на формирование состава наноразмерных поверхностных слоёв
медно-никелевого сплава имплантацией ионов O^+**

*Т. С. Картапова, В. Л. Воробьёв, О. Р. Бакиева,
Ф. З. Гильмутдинов, П. В. Быков, В. Я. Баянкин*

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Формирование химического и фазового составов, атомной и локальной атомной структур поверхностных слоёв металлических материалов, в том числе наноразмерных, с улучшенными механическими и эксплуатационными свойствами различными физическими или химическими методами, в частности имплантацией ионов O^+ , относится к одному из направлений современной науки и техники [1, 2]. Несмотря на исследования в этом направлении до сих пор остаются не выясненными процессы формирования этих слоёв, структурные механизмы их реализации и природа изменения различных свойств металлов и сплавов в результате ионного облучения. В связи с этим, целью данной работы являлось сравнительные исследования формирования химического состава медно-никелевого сплава с соотношением компонентов примерно 50/50 имплантацией ионов O^+ , Ag^+ и поочерёдной имплантацией ионов Ag^+ и O^+ в импульсно-периодическом режиме.

В ходе исследований выявлено, что после имплантации ионов O^+ наряду с накоплением и формированием профиля распределения атомов кислорода наблюдается обогащение наноразмерных поверхностных слоёв медно-никелевого сплава никелем, в то время как после имплантации ионов Ag^+ , напротив, обогащение наноразмерных поверхностных слоёв происходит атомами меди. Это свидетельствует о разных механизмах сегрегаций компонентов медно-никелевого сплава при облучении ионами инертной Ag^+ и химически активной O^+ природы. В работе показано, что медь сегрегировавшая к поверхности в условиях имплантации ионов Ag^+ препятствует внедрению кислорода в наноразмерные поверхностные слои исследуемого сплава при последующей имплантации ионов O^+ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований УрО РАН №15-17-2-50.

1. А. Д. Погребняк, В. М. Береснев и др. Свойства нанокompозитных нитридных покрытий // ФИП. 2011. Т. 9. № 4. с. 284 – 321;
2. И. А. Курзина, И. А. Божко, Н. А. Попова и др. Особенности формирования оксидных фаз в условиях ионного облучения титановых сплавов // Известия РАН. Серия физическая. 2013. Т. 77. № 9. с. 1271 – 1275.

***In situ* исследования процесса синтеза коллоидного раствора золотых наночастиц в октадеcene**

М. В. Киричков

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Был проведен синтез коллоидного раствора золотых наночастиц. В одной емкости смешали: 0,1 г тетрахлоуроурата(III) натрия (AuCl_4NA), 20 мл 1-октадецена ($\text{C}_{18}\text{H}_{36}$) и 2 мл олеиламина ($\text{C}_{18}\text{H}_{37}\text{N}$). В течение 120 минут реакционная смесь находилась при температуре 80 °С. После охлаждения смеси до комнатной температуры в емкость было добавлено 20 мл изопропанола ($\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$) для осаждения золотых наночастиц. Далее реакционная смесь была помещена в центрифугу для получения осадка. Полученный осадок был 2 раза промыт в этаноле ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$) и разведен в гексане (C_6H_{14}).

Для *in-situ* анализа динамики распределения наночастиц по размерам был использован анализатор размеров частиц NANO-flex 180° DLS. Общее время анализа составило 90 мин, время одного измерения – 90 сек. В качестве фонового раствора была использована смесь октадецена и олеиламина в отношении 10/1 соответственно при температуре 80 °С. Время измерения фона – 300 сек.

Для *in-situ* Uv-vis анализа реакционной смеси был использован спектрофотометр Agilent/Varian Cary 50 UV-Vis Spectrophotometer. Для анализа была использована кварцевая кювета HellmaAnalytics 10*4 мм. Всего было получено 70 спектров с интервалом 3 мин. Во время проведения анализа температура кюветы поддерживалась на отметке 80 °С.

1. Menghan Wang, Chao Wang, Kaylie L. Young, Liangliang Hao, Milica Medved, Tijana Rajh, H. Christopher Fry, Leyi Zhu, Gregory S. Karczmar, Cornelius Watson, J. Samuel Jiang, Nenad M. Markovic, and Vojislav R. Stamenkovic «Cross-linked Heterogeneous Nanoparticles as Bifunctional Probe». Chem. Mater. 2012. №24, p. 2423–2425.

Разработка содержащих полианилин композитов на основе углеродной ткани для гибких электродов суперконденсаторов

*А. А. Климонт, С. В. Стаханова, А. В. Астахов, А. Т. Калашиник,
И. С. Кречетов, К. А. Семушин, Е. Е. Казенас, Р. Р. Галимзянов*

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

Получены и электрохимически охарактеризованы содержащие полианилин (ПАНИ) композиты на основе промышленно выпускаемой углеродной ткани Бусофит Т-040 (г. Светлогорск, республика Беларусь), волокна которой обладают собственной пористостью.

Для введения ПАНИ в состав композита использовали метод окислительной полимеризации, преимуществами которого являются высокие технологичность и универсальность. С целью изучения микроструктурных особенностей композитов Бусофит Т-040/ПАНИ регулировали массовую долю ПАНИ в их составе в пределах 3–35 %, варьируя исходные концентрации реагентов и температуру процесса полимеризации. Электронно-микроскопические исследования показали, что композит Бусофит Т-040/ПАНИ имеет необычную морфологию: ПАНИ образует на поверхности углеродного волокна индивидуальные гранулы диаметром около 30-50 нм, которые располагаются преимущественно в порах углеродного материала (УМ) или возле их стенок. Открытая пористая структура УМ при этом практически полностью сохраняется. Значительная доля свободного от полимера углеродного материала обеспечивает сохранение высокой электропроводности композита, а также КПД электродных структур на его основе. С увеличением содержания ПАНИ в композите растет и количество гранул на поверхности УМ.

Электрохимические тесты показали, что оптимальным соотношением ёмкостных характеристик и КПД обладает композит с массовой долей ПАНИ 25 %, для которого значения удельной ёмкости составляют 250 Ф/г и 7,5 Ф/см² при $\eta_{(Q)}$ 97–99 % (против 145 Ф/г и 3,4 Ф/см² у исходного пористого углеродного материала).

Описанные выше морфологические особенности позволяют не только достичь двухкратного увеличения ёмкостных характеристик полученных композитов по сравнению с исходными углеродными материалами за счет сочетания псевдоёмкости ПАНИ и ёмкости двойного электрического слоя УМ, находящегося в основании электрода, но и обеспечить высокие значения электропроводности и КПД электродных структур на их основе. Разработанные композиты представляются особенно перспективными для формирования гибких электродных структур при создании симметричных суперконденсаторов с высокой энергоёмкостью.

Особенности электронного транспорта декагональных квазикристаллов системы Al-Co-Cu(Fe)

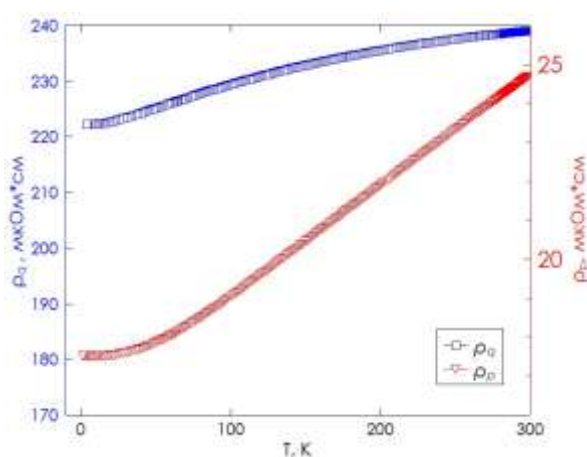
М. В. Ключева, Д. А. Шулятев

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

Монокристаллические образцы Al-Co-Cu(Fe) в виде вытянутых десятигранных призм длиной до 4 мм и сечением до 3 мм были получены методом роста из раствора в расплаве. Исходные компоненты Al, Cu и Co с добавлением 0,08 ат. % Fe смешивались в необходимой пропорции так, чтобы состав расплава соответствовал области первичной кристаллизации декагональной фазы. Скорость кристаллизации составляла 2 град/ч. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализы показали, что полученные монокристаллы представляют собой однофазные образцы с декагональной симметрией.

Из огранённых монокристаллов вырезались образцы в форме ориентированных прямоугольных параллелепипедов, на которых стандартным четырехконтактным методом измерялись температурные зависимости сопротивления в диапазоне температур 1,4–300 К и в магнитных полях 0–18 Тл.

На рисунке представлены температурные зависимости удельного электросопротивления в нулевом магнитном поле вдоль аperiodического направления и вдоль перпендикулярной ему аperiodической плоскости. Наблюдается сильная анизотропия сопротивления: кривая $\rho_p(T)$ демонстрирует линейный ход, в то время как кривая $\rho_q(T)$ хорошо аппроксимируется полиномом второго порядка. Также наблюдается сильная анизотропия магнетосопротивления: при протекании тока вдоль квазипериодической плоскости магнетосопротивление положительно ($\Delta\rho/\rho \sim 10^{-3}$), при протекании же тока вдоль периодического направления магнетосопротивление слабо отрицательно.



Температурные зависимости удельного электросопротивления в нулевом поле для образцов, ориентированных в периодическом направлении $\rho_p(T)$ и в аperiodической плоскости $\rho_q(T)$

Часть данного исследования была выполнена в Национальной Лаборатории Сильных Магнитных Полей (США), которая финансируется американским Национальным Научным Фондом (NSF Cooperative Agreement DMR-1157490) и штатом Флорида.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по программе повышения конкурентоспособности НИТУ «МИСиС» среди ведущих

мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 г.г. и проекта No 3.2076.2014/К конкурсной части государственного задания вузам, подведомственным Минобрнауки России в сфере научной деятельности.

1. Шулятев, Д. А., М. В. Ключева, и У Девараджан. «Анизотропия электротранспортных свойств декагональных квазикристаллов Al-Cu-Co(Fe)». *Физика Металлов и Металловедение* 117, вып. 7 (2016 г.).

Мессбауэровское исследование продуктов электродугового синтеза Fe-углеродных нанокластеров

В. С. Козлов¹, В. Г. Семенов², В. В. Панчук²

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

² *Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета,
Санкт-Петербург, Россия*

Углерод-инкапсулированные магнитные наночастицы 3-d металлов, представляют особый интерес из-за их магнитных свойств. При сохранении физико-химических свойств, атомы или металлические кластеры, заключенные в углеродную оболочку, приобретают комплекс новых, обусловленных структурой ядро-оболочка, свойств для их использования в практических целях (биосовместимость, стабильность и защищенность от влияния окружающей среды и т. д.). В результате электродугового сжигания композитных электродов инкапсуляция атомов металла может происходить в многослойную графитовую оболочку (онионы), многослойные углеродные нанотрубы, структуры ядро-оболочка или в фуллереновый кейдж (эндометаллофуллерены). Однако эндометаллофуллерены группы 3-d металлов изучены крайне недостаточно и возможность их получения в макроколичествах остается под большим вопросом.

Мессбауэровская спектроскопия обладает абсолютной селективностью по мессбауэровскому изотопу ⁵⁷Fe и позволяет проследить за изменением локального окружения атомов железа получить данные о фазовом составе железосодержащих фаз. В данной работе представлены результаты исследования методом Мессбауэровской спектроскопии фазового и магнитного состояния продуктов электродугового синтеза Fe-углеродных нанокластеров, полученных с использованием различных прекурсоров (Fe₂O₃, пиролизат фталоцианина железа) и способов экстракции (Сокслет, ультразвуковая экстракция) углеродного конденсата в органических растворителях различной полярности (о-ксилол, анилин, диметилформамид).

Определен фазовый состав нового молекулярного прекурсора - пиролизата фталоцианина железа с целью его возможного применения для направленного синтеза ЭМФ Fe. Показано, что синглетная линия с отрицательным химическим сдвигом, наблюдаемая в Мессбауэровских спектрах образцов соответствует фазе γ-Fe, а не металлофуллерену железа. В спектрах экстракта и его гидроксил - производной наблюдается появление суперпарамагнитных фаз железа и его карбида. Установлена прямая корреляция магнитной восприимчивости с процентным содержанием магнитных фаз в исследованных образцах.

Кристаллическая структура Си-нанотрубок

А. Л. Козловский, К. К. Кадыржанов

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

За последние несколько лет много усилий было направлено на получение микро- и наноструктур в форме полых трубок, в силу их специфической структуры, уникальных свойств, которые отличаются от стрежней [1], проволок и широко распространенных приложений в качестве потенциальных фотонных кристаллов, катализаторов, датчиков, носителей доставки лекарственных средств, биомедицинских агентов и химических реакторов. В данной работе рассмотрена методика получения полых Си – нанотрубок с применением шаблонного синтеза, а также проводится характеристика их морфологических и электрических свойств. Осаждение Си осуществляется электрохимическим методом при различных потенциалах осаждения. Характеристика структурных особенностей проводится методами растровой электронной микроскопии (РЭМ), энергодисперсионного анализа (ЭДА) и рентгенодифрактометрического анализа (РСА), и, косвенно, при изучении электропроводности. Атомное соотношение Си в нанотрубках составило 100 % для всех исследуемых образцов, без оксидных примесей. Согласно дифрактограммам, образцы Си – нанотрубок обладают ГЦК – структурой с параметром ячейки отличающимся от эталонного (3.6130 Е). Исследование вольт-амперных характеристик полученных Си – нанотрубок показало, что с изменением площади проводящей поверхности, а также преобладанию выделенного направления (111) в кристаллической текстуре полученных образцов значение удельной проводимости увеличивается на 1.7 % для 1.25 В и на 2.3 % для 1.5 В. Таким образом, изменяя условия синтеза наноструктур можно изменять кристаллическую структуру нанотрубок, при этом увеличивая проводимость и снижая сопротивление нанотрубок.

1. S. W. Kim, M. Kim, W. Y. Lee, T. Hyeon, J. Am. Chem. Soc. 2002. 124. P.7642.

Магнитные наночастицы для биомедицинского применения

В. К. Кочкина, О. Е. Положенцев, В. В. Бутова, А. В. Солдатов

*Международный исследовательский центр «Интеллектуальные материалы»,
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

В настоящее время наблюдается значительный рост применения наноразмерных материалов, в частности магнитных наночастиц оксидов железа в медицине [1–3]. В данной работе был проведен синтез наночастиц магнетита с использованием микроволнового излучения. Размеры чистых наночастиц магнетита не превышают 40 нм. Было проведено исследование размера, формы и морфологии поверхности наночастиц с помощью электронной микроскопии (ТЕМ). Определение усредненной кристаллической структуры и оценка среднего размера кристаллитов проводились с использованием метода рентгеновской дифракции (XRD). Элементный состав, содержание примесей в наночастицах определялся рентгенофлуоресцентным методом (XFR). Экспериментальные спектры рентгеновского поглощения за *K*-краем железа были зарегистрированы на лабораторном спектрометре рентгеновского поглощения Rigaku R-XAS. Структура композитных частиц из оксида железа и органических молекул, лигандов, а также характер взаимодействия молекулярных структур с неорганическим ядром из оксида железа были исследованы, используя Фурье ИК-спектроскопию (FTIR). Магнитные характеристики, петли гистерезиса магнитных железосодержащих наночастиц были измерены с помощью вибрационного магнитометра (VSM, Курчатовский институт, Россия).

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ № 14-35-00051.

1. L.H. Reddy, J. L. Arias, J. Nicolas, and P. Couvreur, Chem. Rev. 112 (11) (2012) 5818–5878.
2. D. Ling, N. Lee, and T. Hyeon, Acc. Chem. Res. 48 (5) (2015) 1276–1285.
3. C. Xu, S. Sun, Adv. Drug Deliv. Rev. 65 (2013) 732–743.

Исследование химического состава изломов и зернограницных сегрегаций в сплавах алюминия

Г. В. Литвиненко¹, И. В. Дятлов^{1,2}, А. А. Блатов^{1,3}

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

² *Союзкомполит, Москва, Россия*

³ *Независимый московский университет, Москва, Россия*

При разработке перспективных материалов проблема управления их структурно-фазовым состоянием чрезвычайно важна. Известно, что многие свойства поликристаллических материалов определяются наличием примеси в межзёрненной границе, существует ряд теоретических численных атомистических расчетов образования сегрегаций примесей, но их экспериментальное обнаружение в легированных алюминиевых сплавах почти не представлено [1–3].

Данная работа посвящена экспериментальному обнаружению зернограницных сегрегаций в системах Al-Zn, Al-Ge и Al-Cu. Экспериментально было рассмотрено их распределение при разных концентрациях примеси и скорости роста. Данные по химическому составу, размерам и скорости роста зернограницных сегрегаций были использованы для численного моделирования процессов диффузии и межкристаллического разрушения в границах зёрен данных сплавов, а также моделирования морфологии приграничной области [4–6]. Для исследования границ зёрен сплава применялось жидкометаллическое охрупчивание сплавов [7], а также методы сканирующей электронной микроскопии и Оже-спектроскопии. Исследования изменения морфологии поверхности границ зёрен проводилось на атомно-силовом микроскопе. Получены гистограммы количественных зависимостей характеристик рельефа границ, данные гистограммы указывают на то, что при химическом травлении происходит выравнивание границ. На примере сплавов системы Al-Zn, Al-Ge и Al-Cu показано, что при малых концентрациях примесей с помощью галлийсодержащих водных растворов удаётся получить хрупкий излом, а при больших концентрациях – нет. Было выявлено наличие рельефа на поверхности излома после ионного травления, также были изучены и описаны морфологические характеристики рельефа излома и его химический состав.

1. Квасов Ф.И., Фридляндер И.Н. Промышленные алюминиевые сплавы. – М.: Металлургия, 1984.
2. Мондольфо Л.Ф. Структура и свойства алюминиевых сплавов, М: Металлургия, 1979.
3. Белов Н.А. Фазовый состав алюминиевых сплавов. М: Изд-во МИСиС, 2009.
4. Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. Термодинамика и кинетика границ зёрен в металлах. М: Металлургия, 1986.
5. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зёрен и фаз. М: Машиностроение, 1991
6. N. Stoop, R. Lagrange, D. Terwagne, P. Reis, J. Dunkel Curvature-induced symmetry breaking determines elastic surface patterns, Nature Materials, 2015.
7. Kovaleva K., Karpushkina A., Litvinenko G., Popova T., Rodin A. Ga Penetration along the Grain Boundaries of Aluminum Alloys. Defect and Diffusion Forum Vol. 363 2015.

Исследование структурных особенностей 4-нитроанилина методами порошковой дифракции

А. А. Лобова, Т. А. Екимова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Ароматические амины и их производные, к числу которых относится 4-нитроанилин, имеют широкий спектр применений [1, 2].

Целью работы было определение кристаллической и атомно-молекулярной структуры 4-нитроанилина по данным порошковой дифракции.

Дифракционный спектр исследуемого соединения был получен на дифрактометре ДРОН-6, в медном $K\alpha$ -излучении, в интервале углов 2θ 10° – 60° с шагом по углу 0.02° . Время экспозиции в каждой точке составляло 10 секунд.

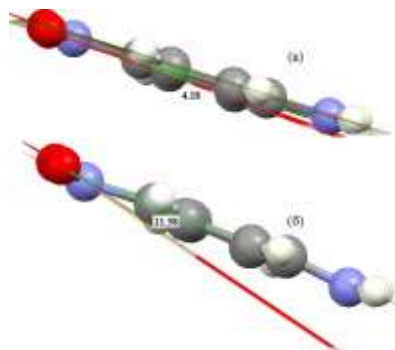
В базе данных CSD (Cambridge Structural Database) были найдены данные о 5 полиморфных модификациях 4-нитроанилина, которые кристаллизуются в близких по симметрии пространственных группах (табл.).

Таблица. Кристаллографические характеристики полиморфных модификаций 4-нитроанилина

Ref-code	a, Å	b, Å	c, Å	β , °	Пр. гр.
NANILI02	12.122(2)	6.027(9)	8.487(1)	92.72	P 2 ₁ /n
NANILI03	12.336(1)	6.071(1)	14.854(3)	35.33	P 2 ₁ /c
NANILI21	12.337(1)	6.037(2)	8.597(5)	91.42	P 2 ₁ /n
NANILI22	8.601(1)	6.043(1)	12.352(2)	91.43	P 2 ₁ /n
NANILI23	8.489(2)	6.027(2)	12.126(3)	92.72	P 2 ₁ /n

Для данных полиморфных модификаций было выполнено уточнение профилейных и структурных характеристик методом Ритвельда, наименьшие факторы недостоверности получены для модификации NANILI03 ($R_p=4.49\%$, $R_w=3.07\%$, $R_e=2.18\%$, $\chi^2=4.3$).

В молекуле, построенной по уточненным значениям координат, нитрогруппа отклоняется относительно плоскости бензольного кольца на 11.58° , тогда как в стартовой модели такое отклонение составляет всего 4.18° (рис.). Как следствие, упаковка молекул в независимой части элементарной ячейки исследуемого соединения по сравнению с исходным изменяется, но характер упаковки остается прежним.



Анализ отклонения нитрогруппы относительно бензольного кольца. (а) до уточнения структуры, (б) после уточнения структуры

Данный факт можно объяснить различием в условиях синтеза исследуемого соединения и соединения, информация о структуре которого содержится в базе данных. Следовательно, можно утверждать, что исследуемое соединение 4-нитроанилина является новой полиморфной модификацией.

1. Шеленкова Л.В. 2,2',7,7'-тетрагидроксидафтилметана и исследование свойств полученных соединений: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук. М., 2011. 18 с.
2. Нисан А. Органическая и печатная электроника- новая ветвь развития // Технологии в электронной промышленности. 2011. № 5. С. 42–47.

Углеродный компонент в композите на основе наноструктурированной целлюлозы

Д. В. Логинов, В. Б. Пикулев, С. В. Логинова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Разработана технология приготовления, исследованы оптические, электрические свойства и структура композитов «нанокристаллическая целлюлоза – наночастицы кремния – углеродная составляющая (в виде фуллеренов или аморфного углерода)». Образцы обладают люминесценцией в красной области видимого спектра, сходной с люминесценцией пористого кремния, однако, в отличие от системы «пористый кремний – фуллерены», процессы самоокисления композита под действием ультрафиолетового излучения в присутствии фуллеренов не идут, что объясняет существенно более высокую деградационную стойкость люминесцентного сигнала. Данный эффект может быть обусловлен избирательным встраиванием частиц кремния в аморфные участки матрицы целлюлозы и формированием на поверхности наночастиц устойчивой водородной пассивации.

Композит, содержащий в своём составе аморфный углерод, обладает как электронной, так и ионной проводимостью, при этом процессы перераспределения объёмного заряда зависят только от ионной составляющей тока. Интенсивность люминесценции уменьшается с увеличением концентрации аморфного углерода в композите, что можно связать как с увеличением вероятности безызлучательной миграции электронов из наночастиц в углеродные цепочки, так и с увеличением коэффициента поглощения материала в диапазоне люминесцентного сигнала.

На рентгенограмме аморфного углерода присутствует явно выраженная аморфная составляющая, а также ряд узких дифракционных максимумов. Максимум в области $1,78 \text{ \AA}^{-1}$, свидетельствующий о наличии в образце пакета графеновых сеток, имеет на рентгенограмме графита индексы интерференции (002).

Рентгенографирование образца экстракта фуллеренов, показало полное отсутствие аморфной составляющей. Качественный фазовый анализ показал наличие в образце фуллеритов C_{60} и C_{70} , а также незначительное присутствие высших фуллеритов.

Анализ рентгенограмм композитов показал, что, в отличие от частиц пористого кремния, встраивания фрагментов углеродной компоненты в полимерную матрицу не происходит.

Ионопроводящие материалы на основе сложных оксидов сурьмы

Ю. А. Луницкая, В. А. Свиридов, А. В. Чередниченко, Д. А. Калганов

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Синтез материалов на основе сложных оксидов сурьмы в виде керамических образцов делает возможным создание на их основе ионообменных и ионопроводящих мембран, электрохимических источников тока, топливных элементов. Получить фазы, имеющие разупорядоченную катионную подрешетку, можно путем гетеровалентного замещения части Sb^{5+} на W^{6+} или Mo^{6+} при нагревании, что позволяет улучшить ионопроводящие свойства этих соединений по катионам щелочных металлов.

Объекты исследований – соединения различного состава $\text{Me}'_x\text{K}_{y-x}\text{Sb}_y\text{Me}''_{2-y}\text{O}_6$ ($\text{Me}' = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{Ag}^+$; $\text{Me}'' = \text{W}^{6+}, \text{Mo}^{6+}$), образующиеся в системе $x\text{Me}'_2\text{O}-y\text{Sb}_2\text{O}_3-2(2-y)\text{Me}''\text{O}_3$ методом твердофазной реакции в интервале изменения ($0 \leq x \leq y$, $1.0 \leq y \leq 2.0$). Приготовленные смеси порошков прокаливали в муфельной печи при температурах $T_1 = 673$ К, $T_2 = 823$ К и $T_3 = 1123$ К до установления их постоянной массы.

Состав образцов определяли методами дериватографии. Контроль фазового состава проводили с помощью дифрактометра ДРОН-3 ($\text{CuK}\alpha_1$ -излучение). Проводимость в температурном интервале 297–1100 К измеряли мостом переменного тока (Р - 5083) при частоте 10^2 – 10^5 Гц на образцах, приготовленных в виде таблеток с использованием прижимных платиновых электродов. Величина электронной составляющей на постоянном токе во всем измеряемом температурном интервале составляла менее 1 % и в дальнейшем не учитывалась. Ошибка в определении ионной проводимости не превышала 5 % от измеряемой величины.

В докладе обсуждаются вопросы образования и устойчивости фаз, образующихся в данной оксидной системе, определения области монофазности соединений антимонат-вольфраматов и антимонат-молибдатов калия при частичном замещении ионов калия ионами лития, натрия и серебра, имеющих структуру типа пирохлора, а также механизм ионного транспорта в сложных оксидах сурьмы для пространственной группы *Fd-3m*.

Структура и свойства новых суперпротоников $\text{Cs}_m\text{H}_n((\text{HSO}_4)_x(\text{H}_2\text{PO}_4)_{m+n-x})$

И. П. Макарова, Е. В. Селезнева, В. В. Гребенев, В. А. Коморников

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

Растущие темпы энергопотребления стимулируют интерес во всем мире к разработкам альтернативных источников энергии, и одна из наиболее быстроразвивающихся отраслей – водородная энергетика. Топливные элементы, основным компонентом которых является протонообменная мембрана, обеспечивают прямое преобразование химической энергии в электрическую. Многообещающее направление связано с созданием материалов для мембран, работающих при $T \approx 150\text{--}400^\circ\text{C}$ (при этих температурах достигается наибольшая эффективность топливных элементов).

Из известных материалов таким требованиям удовлетворяют кристаллы $M_m\text{H}_n(\text{XO}_4)_{(m+n)/2} \cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{K, Rb, Cs, NH}_4$; $X = \text{S, Se, P, As}$). Именно у представителей этого семейства, CsHSO_4 и CsHSeO_4 , была обнаружена впервые высокая протонная проводимость. Полученные данные о кристаллах-суперпротониках позволяют сделать вывод о различных структурных механизмах изменений их физических свойств: формирование динамически разупорядоченной системы водородных связей [1], образование многофазного состояния [2], формирование частично разупорядоченной системы водородных связей, формирование каналов для движения ионов M [3, 4].

Впервые проведены исследования системы $\text{CsH}_2\text{PO}_4\text{--CsHSO}_4\text{--H}_2\text{O}$, определены условия получения и выращены новые кристаллы $\text{Cs}_3(\text{HSO}_4)_2(\text{H}_2\text{PO}_4)$ [5], $\text{Cs}_4(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$ [6] и $\text{Cs}_6\text{H}(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)_4$ [7]. Установлено, что различие свойств $\text{Cs}_3(\text{HSO}_4)_2(\text{H}_2\text{PO}_4)$ и $\text{Cs}_4(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$, включая кинетику суперпротонных фазовых переходов, обусловлено статистическим замещением тетраэдров $\text{PO}_4 / \text{SO}_4$ и уменьшением числа водородных связей. Уникальные по структуре кристаллы $\text{Cs}_6\text{H}(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)_4$ переходят в суперпротонную фазу при относительно невысокой температуре $\sim 120^\circ\text{C}$, и суперпротонная фаза сохраняется при охлаждении достаточно долго без существенного снижения проводимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке по Программе фундаментальных исследований ОФН РАН II.5.

1. И.П. Макарова // Физика твердого тела. 57(3), 432 (2015).
2. И.П. Макарова и др. // Кристаллография. 55(3), 429 (2010).
3. I. Makarova et.al. // Acta Cryst. B70, 218 (2014).
4. E.V. Dmitricheva et.al. // Solid State Ionics. 268, 68 (2014).
5. И.П. Макарова и др. // Кристаллография. 60(4), 552 (2015).
6. I. Makarova et.al. // Acta Cryst. B72 (2016).
7. В.В. Гребенев и др. // Кристаллография. 58(6), 896 (2013).

Локальное атомное строение наночастиц сульфида кадмия

А. В. Максимова, В. Г. Власенко, А. В. Козинкин

*Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики,
Ростов-на-Дону, Россия*

Методом рентгеновской спектроскопии поглощения проведено исследование локального атомного строения наночастиц сульфида кадмия, стабилизированных в полимерных матрицах с целью определения расстояний, координационных чисел и типа окружающих атомов вокруг поглощающего атома кадмия.

На рис. 1 и 2 приведены соответственно спектры поглощения и модули Фурье-трансформант (МФТ) EXAFS спектров двух образцов CdS 01 и CdS 02. Основные характеристики локальной атомной структуры получены путем подгонки и сведены в таблицу.

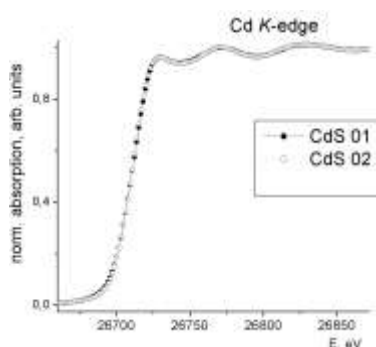


Рис. 1. Спектры поглощения образцов наночастиц CdS 01 и CdS 02

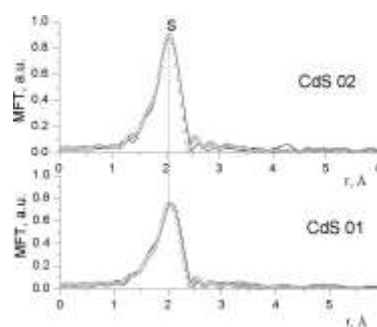


Рис. 2. Модули Фурье трансформант EXAFS-спектров образцов наночастиц CdS 01 и CdS 02

Как видно из рисунков, спектры поглощения и МФТ EXAFS спектров двух образцов CdS 01 и CdS 02 практически идентичны. В МФТ проявляется только одна сфера, что согласуется с данными просвечивающей электронной спектроскопии (ПЭМ) о небольших размерах наночастиц CdS. Незначительное различие наблюдается в увеличении амплитуды пика в МФТ (рис. 2) для образца CdS 02 по сравнению с CdS 01, что свидетельствует о небольшом увеличении координационного числа в наночастице CdS 02 (табл.).

Таблица. Структурные характеристики ближайшего окружения атома кадмия в исследуемых образцах и стандартном соединении

Образец	N	R, Å	$\sigma^2, \text{Å}^2$	Q*, %
CdS 01	2.2	2.54	0.0042	4.4
CdS 02	2.5	2.54	0.0042	6.2
CdS кристалл	4	2.517	—	—

Наилучшая подгонка (обозначена кружками) получается с использованием структурных параметров кристаллического CdS. Первая координационная сфера для обоих образцов, соответствует атомам серы, расположенным на одинаковом расстоянии 2.54 Å, от атомов кадмия, но меньше чем в кристаллическом образце. Для первого и второго образцов координационные числа соответственно равны 2.2 и 2.5 и практически в два раза меньше, чем в кристаллическом образце. Такие различия в расстояниях и координационных числах наночастиц по сравнению с кристаллом еще раз свидетельствуют о наноразмерности исследуемых наночастиц сульфида кадмия.

Сравнительный анализ результатов рентгенографического исследования углеродных материалов

А. Н. Матвеева, К. И. Боржова, Д. В. Логинов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

В работе представлены результаты рентгенографического исследования синтезированных (однослойных, многослойных углеродных нанотрубок и смеси однослойных и многослойных углеродных нанотрубок, и стеклоуглерода) и природного углеродного материала (шунгита).

Рентгенографирование образцов проводилось на автоматизированном дифрактометре ДРОН-6 в МоК α -излучении.

На кривых распределения интенсивности рассеяния $I(s)$, присутствует максимум в области $s = 1.78 \text{ \AA}^{-1}$, который характерен для отражения (002) на рентгенограмме графита.

Из функций парного взаимодействия были рассчитаны характеристики ближнего порядка.

Анализ результатов расчета радиусов r_i и размытий σ_i координационных сфер и координационных чисел N_i исследуемых материалов показал, что области ближнего упорядочения в исследуемых образцах по своей организации отличаются от соответствующих областей гексагонального графита и друг от друга распределением атомов по координационным сферам, но значения радиусов близки к средневесовым значениям для гексагонального графита.

Построены наиболее вероятные модели расположения атомов в области ближнего упорядочения для образцов ОУНТ и МУНТ, учитывая данные полученные из спектров комбинационного рассеяния. Наиболее вероятные кластеры, включают в себя пакеты графеновых слоев.

Кластер, описывающий структуру шунгита и стеклоуглерода состоит из четырех графеновых слоев 18×18 трансляций элементарной ячейки графита по осям x и y . Межсеточные расстояния для кластера шунгита составляют 3.45 \AA , 3.2 \AA , 3.55 \AA и углы поворота второго, третьего и четвертого слоев, относительно первого на 3.4° , 3.2° и 3.5° соответственно. Число атомов в кластере 2442.

Расстояние между графеновыми слоями в кластере стеклоуглерода составляет 3.35 \AA , а углы поворота 2-4 слоев, относительно первого на 5° , 10° и 7° соответственно. Число атомов в кластере 2592.

Влияние термического отжига на проводящие свойства CoFeMg-нанотрубок

Т. Ю. Мейримова, А. Л. Козловский, К. К. Кадыржанов

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

Металлические наноструктуры представляют огромный интерес, так как обладают необычными оптическими, электронными, магнитными и химическими свойствами. Существует различные возможности их применения в оптоэлектронных устройствах [1], в качестве катализаторов [2] в химических реакциях, а также в качестве биосенсоров [3]. Для получения металлических нанотрубок и нанопроволок удобно использовать метод темплатного синтеза. Главным достоинством данного метода является возможность контролировать скорость осаждения металлов в поры, путем изменения величины силы тока и приложенного напряжения, а также временем осаждения. Регулируя эти параметры можно получить наноразмерные объекты с желаемой структурой.

В данной работе рассмотрено влияние добавки магния в структуру CoFe нанотрубок на проводящие свойства при термическом отжиге. В качестве шаблонной матрицы использовали полимерные полиэтилентерефталатные мембраны с диаметрами пор 390–400 нм. Для изучения характеристик полученных нанотрубок были использованы методы РЭМ, ЭДА, РСА. Показано, что добавление Mg в атомном соотношении 1,2 % приводит к появлению второго минимума на графики зависимости изменения сопротивления от времени отжига, что может быть объяснено изменением кристаллической текстуры, а также снижению дефектной структуры в процессе отжига.

1. J.C. Hulteen, C.R. Martin // J. Mater. Chem. 1997, V.7, p.1075.
2. D. Fink, A.V. Petrov, V. Rao et al. // Rad.Meas. 2003, v. 36, p 751.
3. D. Gehlawat, R.P. Chauhan // Materials Chemistry and Physics 145 (2014) 60 – 67.

Формирование пленок ZnO и двойных пленок ZnO/AlN на подложках лейкосапфира с высокой скоростью роста

*А. Э. Муслимов², А. М. Исмаилов¹, С. Л. Гамматаев¹, И. Ш. Алиев¹,
А. В. Буташин², В. М. Каневский²*

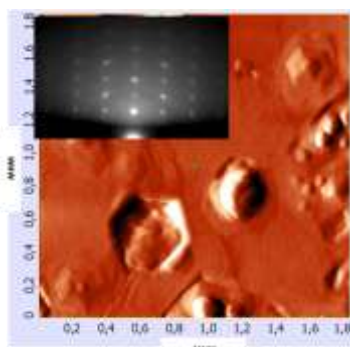
¹ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

² Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

В работе приведены результаты экспериментов по синтезу эпитаксиальных пленок оксида цинка в режиме распыления керамической мишени ZnO в атмосфере кислорода при больших плотностях разрядного тока ($j > 60$ мА/см²). Данная методика позволяет выращивать пленки оксида цинка со скоростью до 15 нм/с и получать пленки толщиной до 300 мкм. В качестве подложек использовались пластины лейкосапфира с предварительным отжигом при температуре 1400 °С, имеющие террасно-ступенчатую структуру (рис. а) на поверхности, а также пластины лейкосапфира с предварительной нитридизацией поверхности (рис. б) по методике [1].



а)



б)

АСМ – изображения поверхности (0001) сапфировой подложки после отжига при 1400 °С (а) и термохимической нитридации (б)

Пленки оксида цинка исследовались рентгеновскими методами, методами дифракции быстрых электронов в геометрии на отражение, методами атомно-силовой, растровой и просвечивающей электронной микроскопии, а также изучались спектры катодolumинесценции (КЛ). Показано, что наличие атомно-гладких террас в первом случае приводит к подавлению доменной структуры пленок. Осуществляемая, во втором случае, предварительная нитридизация также способствует эпитаксиальному росту пленок ZnO. О сохранении высокого совершенства ZnO, при высокой скорости роста свидетельствуют данные структурных исследований, а также наличие узких экситонных полос КЛ и их фононных повторений при 80 К. Полученные нами результаты могут найти применение в нитридных технологиях, биосенсорике, а также в функциональных устройствах на основе поверхностных акустических волн, а также являться перспективной заменой объемным кристаллам ZnO.

Работа поддержана РФФИ (16-02-00227).

1. Нижанковский С.В., Крухмалев А.А., Калтаев Ч.Ш. и др. // ФТТ. 2012. Т. 54.№9. С. 1777.

Интерфейс в композитах ПСКК-ФОСФАТ

А. С. Неустроев, В. М. Чернов, Д. А. Захарьевич

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Авторами были синтезированы и изучены протонпроводящие композиты полисурьмяная кристаллическая кислота $H_2Sb_2O_6/MeH_2PO_4$ ($Me = K, Na$) (ПСКК/фосфат), в которых обнаружено значительное (на 1,5–2 порядка) увеличение протонной проводимости и диэлектрической проницаемости при объемной доле фосфата 10–15 % [1]. Образцы изучались методом рентгенофазового и термогравиметрического анализа, измерения $1H$ ЯМР проводились на импульсном спектрометре ЯМР на резонансной частоте протонов 25 МГц. В диапазоне температур 20–140 °С. Снят спад ядерной поперечной намагниченности с помощью либо одиночного 90° импульса, либо методом Хана с использованием последовательности импульсов $90^\circ 0-\tau-180^\circ 90$.

Можно предположить, что состав интерфейса близок к составу ортофосфорной кислоты. Исчезновение в спектрах ЯМР компоненты с малым временем релаксации («кристаллической») в температурном интервале 80–100 °С является результатом «плавления» интерфейса, сопровождающегося эндоэффектом на кривых ДСК. Таким образом, наблюдаемое увеличение протонной проводимости в композитах ПСКК-фосфат является результатом образования на поверхности раздела интерфейса, состав которого определяется реакцией обмена между компонентами и близок к ортофосфорной кислоте. Интерфейс при обычных условиях находится в квазижидком состоянии и окончательно плавится при температурах близких к 100 °С. температуре плавления ортофосфорной кислоты. При этом состав интерфейса не меняется в ходе превращений компонентов, связанных с дегидратацией компонентов, вследствие чего фазовые превращения компонентов не оказывают значительного влияния на транспортные характеристики композита. Полученные результаты представляют интерес для создания новых мембран для фосфорнокислых топливных элементов.

1. Неустроев А.С., Захарьевич Д.А. // Электрохимия, т.51, №5, 2015, с.512-516.

Проводимость и аномальный эффект Холла нанокомпозитов $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{AlO}_y)_{100-x}$

*С. Н. Николаев¹, К. Ю. Черноглазов¹, В. А. Демин¹, Н. К. Чумаков¹,
В. А. Леванов^{1, 2}, И. Д. Родионов², А. В. Ситников³, Ю. Е. Калинин³,
А. Б. Грановский², В. В. Рыльков¹*

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

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

³ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

В диапазоне температур 4,2–300 К исследованы транспортные свойства пленочных нанокомпозитов $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{AlO}_y)_{100-x}$ на основе нестехиометрического оксида AlO_y с содержанием аморфного ферромагнитного металла вблизи порога перколяции ($56 > x > 30$ at. %). Данная система интересна своими спин-стекольными свойствами, а также наблюдаемым в ней эффектом резистивного переключения под действием электрического поля, предположительно связанным с движением в диэлектрике вакансий кислорода (или ионов бора), который может быть использован для создания мемристоров.

Установлено, что при содержаниях металла $56 > x > 49$ at. % для проводимости выполняется логарифмический закон $\sigma(T) = A(1 + \alpha \ln T)$, причем произведение параметров $A \cdot \alpha$ практически не зависит от x . Данная зависимость согласно существующей теории [1] объясняется особенностями кулоновского взаимодействия в металл-диэлектрических нанокомпозитах в переходной области концентраций от металлической проводимости к диэлектрическому режиму. Проводимость образцов с меньшими концентрациями металла ($x < 49$ at. %) следует «закону $1/2$ ».

Впервые в нанокомпозитах в условиях логарифмической зависимости проводимости обнаружен необычный скейлинг в поведении сопротивления аномального эффекта Холла (R_H) от продольного сопротивления (R_{xx}): $R_H \propto (R_{xx})^m$, где параметр $m = 0,4-0,6$ при изменении температуры и $m = 0,2-0,24$ при изменении x в диапазоне 49–56 at. %. Обнаруженный скейлинг связывается с нестехиометричностью оксида и спин-орбитальным рассеянием электронов на дефектах (вакансиях кислорода) при их межгранульном туннелировании [2]. Подобный скейлинг в нанокомпозитах типа Ni-SiO₂ со стехиометрическим диэлектриком отсутствует [3].

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 15-07-01160, № 15-02-02077, № 16-07-00798, № 16-07-00657.

1. I.S. Beloborodov et al., Granular electronic systems. Rev.Mod. Phys. 79, 469 (2007).

2. A. Vedyayev et al., Spontaneous Anomalous and Spin Hall Effects Due to Spin-Orbit Scattering of Evanescent Wave Functions in Magnetic Tunnel Junctions. Phys. Rev. Lett., V.110, 247204 (2013).

3. D. Bartov et al., Absence of the ordinary and extraordinary Hall effects scaling in granular ferromagnets at metal-insulator transition. Phys. Rev. B, 90, 144423 (2014).

Влияние постоянного магнитного поля на старение алюминиевого сплава АК9

Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, М. С. Морозов

*Самарский государственный аэрокосмический университет им. С. П. Королева
(национальный исследовательский университет), Самара, Россия*

Как показано в [1], наложение постоянного магнитного поля (ПМП) на искусственное старение бериллиевой бронзы БрБ-2 приводит к значительному увеличению микротвердости данного сплава до ~ 30 %, изменению процессов фазообразования и магнитных свойств. На наш взгляд, представляет интерес выяснение степени общности эффекта влияния наложения ПМП на процесс старения других металлических сплавов, в частности, на литейный алюминиевый сплав АК9.

Совокупный анализ полученных данных показал, что наложение ПМП напряженностью 7 кЭ на искусственное старение исследуемого сплава при температуре 175 °С длительностью от 2 до 8 ч всегда приводит к уменьшению микротвердости до 34 %, при этом пластические свойства сплава возрастают. Наблюдается, так называемый, положительный магнитопластический эффект (МПЭ) [2–4]. Кроме этого, методом рентгеновского анализа обнаружено, что значения средних размеров блоков когерентного рассеяния при наложении ПМП всегда больше, чем в его отсутствие, а величина относительной микродеформации и плотность дислокаций при наложении поля меньше, чем значения, полученные без него. Это свидетельствует о том, что структура сплава при наложении ПМП становится более однородной и совершенной.

Старение сплава в ПМП и без него при 4 ч приводит к уменьшению средних размеров блоков когерентного рассеяния до наноразмеров, данный факт может иметь практическое значение для получения наноматериалов с заданными свойствами.

Обсуждаются возможные физические механизмы МПЭ в исследуемом сплаве, и режимы старения, определяющие оптимальные физико-механические свойства сплава.

1. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. ФХОМ. 3, 18 (2003).
2. М.И. Молоцкий. ФТТ. 33, 3112 (1991).
3. Ю.И. Головин. ФТТ. 46, 769 (2004).
4. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева. Е.А. Петржик. Кристаллография. 48, 838 (2003).

Исследование особенностей кристаллической структуры слоистых сотообразных оксидов $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ и $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ методами дифракции нейтронного и синхротронного излучения

С. Ю. Подчезерцев^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, А. Л. Малышев², Е. А. Церковная²

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

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

Благодаря обилию проявляемых свойств, как магнитных, так и транспортных, все большее внимание исследователей в последние годы привлекают к себе слоистые оксиды щелочных и переходных металлов с кристаллической структурой типа медовых сот. Свойства, проявляемые данными соединениями, зависят как от катионного состава, так и от их локального окружения, а сложный характер меж- и междуслоевых обменных взаимодействий ведет к возникновению большого разнообразия магнитных упорядочений [1]. Точное знание кристаллической структуры данного семейства соединений является необходимым для детального описания проявляемых ими свойств. Целью данной работы являлось уточнение кристаллической структуры, а также определение характеристических фрагментов элементарных ячеек соединений $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ и $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$.

Дифракционные эксперименты проводились на порошковом дифрактометрах ID31 ESRF и SSPD ПИЯФ НИЦ «КИ». Анализ данных проводился с использованием программного пакета FullProf suite.

В ходе работы установлено, что соединения изоструктурны и описываются пространственной группой $C2/m$, определены характерные межатомные и междуслоевые расстояния, валентные углы, необходимые для описания магнитных упорядочений в исследуемых системах, проведен анализ уширения пиков.

Для соединения $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ выявлены локальные искажения CoO_6 октаэдров, которые могут приводить к расщеплению 3d оболочки Co^{2+} при котором ху орбиталь является более высокоэнергетичной для высокоспиновой конфигурации иона. В случае Ni^{2+} в соединении $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ ситуация аналогична.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16- 02-00360.

1. R.F. Bishop, P. H. Y. Li and C.E. Campbell, J. Phys.: Condens. Matter 25, (2013).

Влияние размера и геометрии металлогидридной засыпки на PCT-диаграммы десорбции водорода

А. И. Пыхтина^{1, 2}, И. А. Романов²

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

² *Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

Новые материалы для хранения водорода, в том числе и наноматериалы на основе углерода не оправдывают возлагаемых на них надежд, однако авторы считают, что для применения в стационарных энергоустановках достаточно уже открытых классов интерметаллических соединений [1]. Так соединения АВ₅-типа на основе LaNi₅ селективно поглощают водород и способны хранить его в твердофазном состоянии неограниченное время без избыточного давления, что позволяет использовать их в системах хранения и очистки, интегрированных с ТПТЭ [2].

Объектом исследования в данной работе являлся водородпоглощающий сплав на основе LaNi₅, для которого были измерены изотермы десорбции водорода образцов массой 100 и 500 г с помощью модифицированного метода Сиверта.

Изотермы образцов различной массы практически полностью совпадают в области насыщенного гидрида, а в области фазового перехода твердый раствор – гидрид наблюдается заметная разница. При 373 К она составляет порядка 0,15 МПа, при 423 К – от 0,3 до 0,5. Масштабный эффект также вносит вклад в равновесные термодинамические параметры реакции десорбции водорода. Возникновение упругих напряжений приводит к уменьшению на 10 % величины ΔH и ΔS реакции десорбции, что существенно выше погрешности определения данных величин с помощью использованной методики.

На данном этапе исследований еще недостаточно данных, чтобы делать выводы о характере зависимости величины от температуры и равновесного давления в системе, необходимо провести дополнительные эксперименты с образцами различной массы в широком диапазоне условий. Однако можно заключить, что возникновение масштабного эффекта связано с фазой твердого раствора водорода в интерметаллиде и процессом образования гидридной фазы, а в чистой гидридной фазе эффект не проявляется.

1. Малышенко С.П., Борзенко В.И., Дуников Д.О., Назарова О.В. Металлогидридные технологии водородного аккумулирования энергии для автономных систем энергообеспечения на основе возобновляемых источников энергии // Теплоэнергетика. – 2012. № 6. С. 50-60.

2. Малышенко С.П. Исследования и разработки ОИВТ РАН в области технологий водородной энергетики // Альтернативная энергетика и экология. – 2011. № 3(95). – С. 1-25.

Динамика решетки многослойной сегнетоэлектрической гетероструктуры

*А. Г. Разумная¹, Ю. И. Головки², Н. В. Лянгузов¹,
Ю. И. Юзюк¹, В. Б. Широков^{1,2}, В. М. Мухортов^{1,2}*

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

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

Сегнетоэлектрические сверхрешетки, состоящие из нескольких чередующихся слоев, могут проявлять лучшие функциональные параметры по сравнению с однокомпонентными пленками или обладать новыми свойствами, которые не наблюдаются в индивидуальных слоях. Особый интерес представляют сверхрешетки на основе классического сегнетоэлектрика BaTiO_3 благодаря его уникальным электрическим и оптическим характеристикам. Свойствами сверхрешеток можно управлять путем чередования слоев различных по химическому составу и по толщине, тем самым варьируя остаточные напряжения, индуцированные несоответствиями кристаллических решеток в смежных слоях.

В данной работе методами рентгеновской дифрактометрии и КРС спектроскопии проведено исследование сверхрешетки состава $\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{TiO}_3/\text{Ba}_{0,4}\text{Sr}_{0,6}\text{TiO}_3$ (BST-0.8/BST-0.4) с целью определения особенностей ее структуры и динамики решетки. Сверхрешетка, состоящая из 11 чередующихся пар слоев BST-0.8/BST-0.4, была выращена методом ВЧ катодного распыления на монокристаллической подложке (001)MgO. Общая толщина гетероструктуры составляла 120 нм.

С помощью рентгеновской дифракции установлено, что период модуляции сверхрешетки равен 11,2 нм при приблизительно равных толщинах слоев BST-0.8 (5,4 нм) и BST-0.4 (5,8 нм). Определено, что параметры элементарной ячейки по нормали к подложке слоев BST-0.8 и BST-0.4 больше, чем у объемных материалов, и равны 0,4047 нм и 0,4035 нм соответственно, что может быть обусловлено сжатием в плоскости сопряжения.

Из анализа температурной зависимости поляризованных спектров КРС обнаружено, что наблюдается ужесточение $E(\text{TO})$ мягкой моды от 79 до 97 см^{-1} в интервале температур 80–350 К. Характерных признаков последовательности фазовых переходов, которые имеют место в объемных образцах твердых растворов титаната бария стронция аналогичных составов не обнаружено, а переход из сегнетоэлектрической в параэлектрическую фазу в сверхрешетке происходит при температуре ~ 350 К. Установлено, что температурное поведение сегнетоэлектрической мягкой моды хорошо согласуется с измерениями диэлектрической проницаемости в интервале температур 80–350 К.

Работа поддержана Российским научным фондом (№ 14-12-00258).

Влияние допирования Eu на диэлектрический отклик и температурную эволюцию доменных структур $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})\text{TiO}_3$

*А. Д. Румянцева^{1, 2}, Е. Д. Румянцева², Е. А. Попова^{2, 3},
П. П. Сырников², С. Г. Лушников²*

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследование сегнетоэлектриков $(\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})\text{TiO}_3$ – (NBT) вызывает интерес как с прикладной точки зрения, поскольку эти материалы обладают гигантскими значениями пьезоэлектрических коэффициентов, так и с точки зрения физики структурных фазовых переходов [1]. Замена классических релаксорных сегнетоэлектриков на основе $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ со структурой перовскита в промышленности обусловлена переходом на экологически чистые безсвинцовые материалы. Наиболее перспективным в этом смысле является NBT, который проявляет признаки релаксорного поведения, но динамика решетки остается предметом широкой дискуссии. При этом известно, что допирование ионами редких земель существенно влияет на такие физические свойства сегнетоэлектриков-релаксоров как параметры сегнетоэлектрических фазовых переходов, величины пьезо- и пьезокоэффициентов.

В настоящей работе представлены результаты исследования диэлектрического спектра и его температурной зависимости в монокристаллах NBT и NBT:Eu (Eu 10 ат% по шихте). Измерения проводились в интервале частот 10 Hz – 10 MHz, в области температур от 77 К до 850 К. Изучалась температурная эволюция доменной структуры кристаллов NBT и NBT:Eu. Результаты обработки и анализа данных дают основания считать, что динамика кристаллической решетки существенно модифицируется при допировании NBT. Меняется также и поведение доменной структуры при изменении температуры. Результаты исследований обсуждаются в рамках современных представлений о динамике кристаллической решетки при структурных фазовых переходах.

1. Tu C.-S., Siny I.G., and Schmidt V.H, Sequence of dielectric anomalies and high-temperature relaxation behavior in $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$, Phys. Rev. B 49, 11550 (1994).

Политетраэдрический локальный порядок и нанокристаллизация в объемноаморфном сплаве $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$

Р. Е. Рыльцев^{1, 2}, Б. А. Клумов^{3, 2}, Н. М. Щелкачев^{1, 2}, К. Ю. Шуняев¹

¹ *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва, Россия*

³ *Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

Объемноаморфные металлические сплавы вызывают интерес исследователей, как в силу практической значимости, так и с фундаментальной точки зрения [1]. Одними из наиболее изучаемых систем данного типа являются сплавы Cu-Zr, обладающие уникальной для бинарных сплавов стеклообразующей способностью [2], природа которой до сих пор неясна.

Методом молекулярной динамики с использованием потенциала погруженного атома была исследована структура сплава $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ при различных скоростях охлаждения в интервале (10^{13} – $1,5 \cdot 10^9$) К/с. Данный сплав соответствует одному из известных составов, для которых возможно получение объемноаморфных образцов.

Обнаружено, что уменьшение скорости охлаждения приводит к формированию более выраженной политетраэдрической структуры, в частности, – к увеличению доли икосаэдрических кластеров. Показано, что предложенная недавно процедура уменьшения эффективной скорости охлаждения путем отжига системы при температурах, близких к температуре стеклования (sub- T_g annealing) [3], является некорректной.

При охлаждении системы со скоростью $1,5 \cdot 10^9$ К/с обнаружено, что в аморфной матрице образуется нанокристаллит со структурой интерметаллида Cu_5Zr , но с другой стехиометрией. Анализ структуры данного кристаллита показал, что его составляющими элементами являются многогранник Каспера и искаженный икосаэдр. Отметим, что из данных элементов состоят также структуры интерметаллидов Cu_2Zr и $\text{Cu}_5\text{Zr}_{14}$. Это позволяет предположить, что политетраэдрическая структура системы Cu-Zr в состоянии переохлажденной жидкости и стекла содержит кластеры указанной симметрии, которые могут образовывать фрагменты стабильных и метастабильных кристаллических структур при локальном упорядочении. Данная гипотеза подтверждается анализом структуры аморфной фазы, который выявил значительные доли указанных кластеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-13-00676).

1. A. Inoue, Stabilization, Acta Mater, 48, 279 (2000).

2. A. Inoue, W. Zhang, Mater Trans, 45, 584 (2004).

3. Y. Zhang, C. Z. Wang, M. I. Mendeleev, F. Zhang, M. J. Kramer, K. M. Ho, Phys. Rev. B, 91, 180201 (2015).

Структурные трансформации в быстрозакаленных аморфизирующихся сплавах $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ и $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$

*А. А. Рыльцева, Т. В. Куликова, В. А. Быков, С. Х. Эстемирова,
В. В. Филиппов, Д. А. Ягодин, К. Ю. Шуняев*

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Система Cu-Zr обладает уникальной стеклообразующей способностью и поэтому является основой для создания объемноаморфных металлических сплавов [1, 2]. Бинарный сплав $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ демонстрирует также эффекты памяти формы за счет формирования метастабильных мартенситных фаз [3]. Известно, что малые добавки алюминия в систему Cu-Zr не только повышают стеклообразующую способность, но и улучшают механические свойства сплава [4–6]. В связи с этим является интересным исследовать влияние алюминия на указанные выше свойства сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$. Ранее было показано, что сплав $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$ обладает наибольшей аморфизирующей способностью среди систем $\text{Cu}_{50-x}\text{Zr}_{50-x}\text{Al}_{2x}$ [6]. Цель данной работы – сравнить особенности протекания мартенситных превращений; аморфизирующую способность; кинетику кристаллизации бинарного сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ и тройной системы $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$.

Образцы были получены двумя способами: путем дуговой плавки (скорость охлаждения около 200 град/сек) и путем вакуумного литья (скорость охлаждения около 1000 град/сек).

Обнаружено, что добавление алюминия в бинарный сплав $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ существенно понижает температуру мартенситного перехода. В тройном сплаве $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$ эта температура равна 275 К, что приводит к возможности протекания изотермического мартенситного превращения при комнатной температуре. Показано, что высокая стеклообразующая способность тройной системы $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$ позволяет получать объемноаморфные образцы при скорости охлаждения порядка 200 К/с, достигаемой при сплавлении в дуговой печи. Структура и термическая стабильность образцов, полученных разными способами, близки. Обнаружено, что кристаллизация объемноаморфного сплава $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$ протекает в две стадии: первая стадия соответствует образованию метастабильного тройного соединения, которое затем распадается с образованием стабильной фазы $\text{Cu}_{10}\text{Zr}_7$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ проекта 14-13-00676).

1. A. Inoue, Acta Mater, 2000, V. 48, p. 279 - 306.
2. Inoue, W. Zhang, Mater Trans, 2004, V. 45, p. 584 - 587.
3. Y. N. Koval, G.S. Firstov, A.V. Kotko, Scripta Metall. Mater., 1992, V. 27, 1611.
4. F. Lu, L. T. Kong, Z. Jiang, et al., J. Mater. Sci., 2014, V. 49, p. 496 - 503.
5. Wang, H. Tan, Y. Li, Acta Mater., 2005, V. 53, p. 2969 - 2979.
6. Q. Zhang, W. Zhang, G. Xie, A. Inoue, Mater. Trans., 2007, V. 48, No. 7, 1626.

Изменение электронной и магнитной структур кубической фазы TbGe_{2,85} под влиянием давления

Д. А. Саламатин^{1, 2, 4}, В. А. Сидоров¹, С. Е. Кичанов², Л. Н. Фомичева¹,
А. В. Николаев^{3, 4}, Д. П. Козленко², О. Л. Макарова, А. В. Цвященко^{1, 4}

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, Долгопрудный, Россия

Поликристаллический образец TbGe_{2,85}, синтезированный при высоком давлении, обладает кубической структурой типа AuCu₃ с пространственной группой Rm-3m и постоянной решетки $a = 4,287$ Å [1].

TbGe_{2,85} упорядочивается при температуре 19 К в несоизмеримую антиферромагнитную спиральную структуру с волновым вектором $\mathbf{k} = 2\pi/a(0.5, 0, 0.165)$ с магнитным моментом Tb $\mu = 7.8$ μ_B [2]. Из измерения температурных зависимостей электрического сопротивления и теплоемкости было обнаружено возникновение волны зарядовой плотности (ВЗП) ниже 145 К [2]. Измерения возмущенных угловых γ - γ корреляций на пробных ядрах ¹¹¹Cd, внедренных в решетку TbGe_{2,85} показали, что ВЗП является несоизмеримой при температурах выше 19 К, а ниже это температуры ВЗП переходит в соизмеримое состояние [2].

Измерения зависимостей электрического сопротивления от температуры при различных давлениях вплоть до 2.6 ГПа показали, что температура ВЗП перехода уменьшается с увеличением давления вплоть до 2.4 ГПа и уже при 2.6 ГПа образование ВЗП не наблюдается. Температура Нееля от давления практически не зависит (см. рис. 1).

Для TbGe_{2,85} при давлениях 1.2 ГПа, 3.1 ГПа и 5.2 ГПа была измерена дифракция нейтронов. Начиная с давления 1.2 ГПа и 10 К наблюдается появление второй соизмеримой с волновым вектором равным $\mathbf{k} = 2\pi/a(0.5, 0, 0)$ (см. рис. 2).

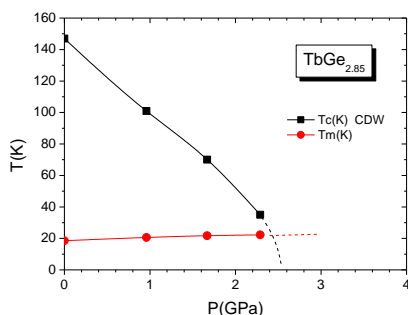


Рис. 1. Зависимости температуры ВЗП переход и температуры Нееля от давления, полученные из измерений электрического сопротивления для TbGe_{2,85}

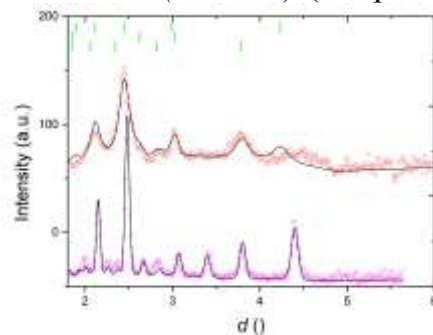


Рис. 2. Нейтронные дифракционные профили TbGe_{2,85}, измеренные при температуре 10 К и при атмосферном давлении (фиолетовый) и давлении 3.1 ГПа (красный)

1. A. V. Tsvyashchenko, A. I. Velichkov, A. V. Salamatin, L. N. Fomicheva, D. A. Salamatin, G. K. Ryasny, A. V. Nikolaev, M. Budzynski, R. A. Sadykov, A. V. Spasskiy, Journal of Alloys and Compounds, 552, 190 (2013).
2. A. V. Tsvyashchenko, D. A. Salamatin, V. A. Sidorov, A. E. Petrova, L. N. Fomicheva, et. al., Phys. Rev. B 92, 104426 (2015).

Влияние условий термообработки на фазовый состав композиционных наноматериалов на основе модифицированного полтитаната калия

*С. И. Саунина¹, Ш. Ш. Ягафаров¹, Е. В. Третьяченко²,
А. В. Гороховский², С. А. Кухарь¹*

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

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

Цель данной работы – исследование влияния температуры и среды термообработки, а также количественного содержания оксида никеля на фазовый состав модифицированных в растворе NiSO_4 полтитанатов калия (МПТК). Содержание никеля в пересчете на оксид в исходных модифицированных образцах составило 25.3, 14.6 и 7.6 масс. %. Термообработка проводилась при температурах 650 °С, 850 °С на воздухе, а при 1100 °С на воздухе и в атмосфере аргона. Исследование фазового состава образцов проводилось методами рентгенофазового анализа (CuK_α), электронной сканирующей микроскопии (JEOL JSM-6510), совмещенного синхронного термического анализа (STA 449 F5 *Jupiter*).

Данные рентгенофазового анализа показали, что в образце с содержанием оксида никеля ~ 25.3 масс. % после термообработки при 650 °С образуется TiO_2 модификации рутил и анатаз, и $\text{Ni}(\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3)$. После термообработки при 850 °С появляется новая фаза $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$. Дифракционные максимумы фазы анатаз отсутствуют. После термообработки при 1100 °С фазовый состав образца такой же, как и при 850 °С. Однако, в атмосфере Ar при 1100 °С отмечается изменение количественного соотношения фаз. По данным синхронного термического анализа на кривой ДСК наблюдается экзоэффект в области ~ 620 °С. В образце, с содержанием оксида никеля ~ 14.6 масс. %, термообработанного на воздухе при 650 и 850 °С, формируется только $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$. При 1100 °С наряду с $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$ образуется ~ 6 % $\text{Ni}(\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3)$. Фазовый же состав образца, термообработанного в атмосфере аргона (1100 °С), представлен только фазой $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$. На кривой ДСК наблюдается экзоэффект в области ~ 710 °С, который, по-видимому, связан с кристаллизацией фазы $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$. В образце с содержанием оксида никеля ~ 7.6 масс. % при всех температурах обработки содержатся фазы $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$ и $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$. Термообработка в атмосфере аргона 1100 °С приводит только к изменению количественного соотношения фаз $\text{KTi}_8\text{O}_{16.5}$ (~ 55 %) и $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ (~ 44 %), в то время как на воздухе составляет ~ 30 % и ~ 70 % соответственно. Кривая ДСК для данного образца без каких-либо особенностей.

Структурная обусловленность физических свойств новых представителей семейства суперпротонных кристаллов

Е. В. Селезнева, И. П. Макарова, В. В. Гребенев, В. А. Коморников

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

С использованием рентгеновского и синхротронного излучений проведены исследования системы твердых растворов $K_3H(SO_4)_2-(NH_4)_3H(SO_4)_2-H_2O$. Интерес к этой системе обусловлен возможностью разработки перспективных материалов для различных электрохимических устройств, включая работающие при умеренных температурах протонообменные мембраны топливных элементов. При этих температурах достигается наибольшая эффективность и экономичность топливных элементов. Практическое применение кристаллов-суперпротоников семейства $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4$; $X = S, Se, P$) выводит на первый план необходимость установления закономерных связей между их составом, атомной структурой и физическими свойствами.

В результате исследований были определены условия воспроизводимого получения новых соединений и выращены новые кристаллы $K_{1-x}(NH_4)_x)_3H(SO_4)_2$ [1, 2], $(K_{1-x}(NH_4)_x)_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ [3, 4], получены данные об их структуре и физико-химических свойствах.

Выращенные кристаллы $(K_{0.43}(NH_4)_{0.57})_3H(SO_4)_2$ являются уникальными, т. к. впервые уже при комнатной температуре полученный материал проявляет суперпротонные свойства. Обнаружено, что при замещении атомов К аммонием даже в небольших количествах (~ 3 %) изменяется система межатомных связей, что приводит к принципиальным изменениям кинетики формирования суперпротонных фаз.

В кристаллах $(K_{1-x}(NH_4)_x)_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ структурный переход связан с выходом кристаллизационной воды, перестройкой системы водородных связей в частично динамически разупорядоченную с дополнительными позициями для протонов, что и обуславливает появление высокой протонной проводимости. Обнаружено, что перестройка водородных связей в кристаллах $(K_{1-x}(NH_4)_x)_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ и затрудненная обратная диффузия воды в кристалл стабилизируют высокотемпературную проводящую фазу и позволяют переохладить ее практически до комнатной температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №16-32-00095 мол_а и ведущей научной школы «От минералов к материалам».

1. Е.В. Дмитричева и др. // Кристаллография (2015), 60(6), с.880 – 886.
2. Е.В. Дмитричева и др. // Кристаллография (2014), 59(3), с.387 – 395.
3. E.V. Dmitricheva et al. // Solid State Ionics (2014), v.268, p.68 – 75.
4. Е.В. Дмитричева и др. // Кристаллография (2014), 59(6), с.966 – 972.

Дифракция отраженных электронов как метод локального фазового анализа тонких пленок $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$

С. В. Сенкевич¹, Д. М. Долгинцев²

¹ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

Тонкие сегнетоэлектрические пленки твердых растворов цирконата-титаната свинца $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$, являются перспективными материалами для широкого круга устройств оксидной микроэлектроники. Пленки PZT были сформированы на подложках $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{TiO}_2/\text{Pt}$ методом ВЧ магнетронного осаждения по двухстадийной технологии – 1) осаждение при низкой температуре подложки, 2) отжиг на воздухе при 540–650 °С. Состав керамической мишени соответствовал атомному соотношению $\text{Zr}/\text{Ti} = 54/46$ и включал дополнительно 10 % избытка оксида свинца. Изменяемыми технологическими параметрами являлись температура отжига и рабочее давление газовой смеси $\text{Ar}+\text{O}_2$, которое варьировалось в диапазоне от 2 до 8 Па. Исследование состава и структуры тонких пленок осуществлялось на растровом электронном микроскопе EVO-40, оснащенный энергодисперсионным анализатором и детектором обратно рассеянных электронов HKL NordlysNano. Диаметр зондирующего электронного пучка составлял ~ 10 нм, что позволяло анализировать дифракционные картины отдельных перовскитовых кристаллитов.

1. Изменение давления рабочего газа позволило провести тонкое варьирование состава Zr/Ti (в пределах 2,5 %) в области морфотропной фазовой границы. Подобное изменение состава пленок связано а) с изменением условий термализации атомов мишени, б) с различием в электрохимических потенциалах атомов циркония и титана.

2. При комнатной температуре и выше в пленках наблюдалось сосуществование двух модификаций – моноклинной (М) и тетрагональной (Т), перовскитовой фазы, соотношение между которыми изменялось с изменением состава и температуры отжига. Повышение температуры отжига пленок приводило к уменьшению доли М-фазы в пользу Т-фазы. Предполагается, что увеличение температуры, при которой происходит кристаллизация фазы перовскита, способствует увеличению элементной неоднородности (атомов Zr и Ti) в объеме пленки и повышению устойчивости Т-фазы. В пользу этой версии свидетельствует и рост доли М-фазы с ростом концентрации атомов свинца в твердом растворе.

Управление физическими свойствами твердых растворов $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ методом механоактивации

*М. А. Сирота¹, К. Г. Абдулвахидов¹, И. П. Дмитренко¹, А. А. Гуда¹,
И. В. Мардасова², М. А. Витченко², В. В. Срабионян, А. Н. Кочетов²,
Г. Б. Сухарина¹, А. В. Солдатов¹*

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

² Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

Функциональные активные элементы на основе твердых растворов $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ (PZT), из-за стабильности их основных свойств в широком диапазоне температур, частот и давлений, до сих пор остаются незаменимыми в диагностике и неразрушающем контроле деталей и узлов металлоконструкций и изделий различного назначения. Однако формирование целевых свойств PZT достигается длительными многостадийными технологическими приемами и путем допирования примесными атомами, что является энергозатратными, трудоемкими методами.

Целью данной работы явилось изучение возможности управления физическими свойствами керамического PZT методом механоактивации синтезированного порошка. В качестве активаторов порошка применялись наковальни Бриджмена и планетарная мельница. На керамических образцах PZT из области морфотропного фазового перехода, полученных в одинаковых температурно-временных режимах, изучены диэлектрические спектры, поляризационные и пьезоэлектрические характеристики и фазовые переходы рентгеноструктурным методом.

Электрофизические свойства и рентгеновские спектры SmFeO_3

*М. А. Сирота¹, К. Г. Абдулвахидов¹, А. А. Гуда¹, И. В. Мардасова²,
Т. В. Шкиль², М. А. Витченко², А. Н. Кочетов², Б. К. Абдулвахидов¹*

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

² Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

Мультиферроик ортоферрит самария SmFeO_3 обладает тем замечательным свойством, что с помощью электрического поля можно управлять магнитными свойствами и, наоборот, магнитным полем управлять электрическими свойствами. Однако большинство электрических и магнитных свойств SmFeO_3 как и всех мультиферроиков напрямую зависит как от размеров доменов и их типа, так и от концентрации химических и структурных дефектов. С целью получения керамики с заданными физическими свойствами, в данной работе нами была поставлена задача варьирования концентрации и типа структурных дефектов после синтеза стехиометрического порошкового SmFeO_3 , для чего с помощью наковален Бриджмена к нему прикладывалось механическое силовое воздействие в сочетании со сдвиговой деформацией. Структурные параметры активированных порошков изучались с помощью рентгеновского дифрактометра HZG-4B, а спектры рентгеновского поглощения за К-краями железа и самария исследуемых образцов после деформации и образцов сравнения – Sm_2O_3 и Fe_2O_3 с помощью спектрометра Rigaku R-XAS.

Диэлектрические свойства и электропроводность керамических образцов изучались с помощью стандартной измерительной аппаратуры. Поляризационные свойства контролировались с помощью стенда, собранной по схеме Сойера – Тауэра.

В результате измерений было обнаружено, что размеры ОКР порошков уменьшаются, электропроводность керамики при комнатной температуре на два порядка τ уменьшается, а величина остаточной поляризованности растет. Степень окисления железа и самария в образцах равна +3 и не изменяется после механического воздействия. Форма спектра поглощения за К-краем железа воспроизводится в рамках теории многократного рассеяния, применённой для структуры перовскита.

Сополифлуорены как светоизлучающие полимеры: структура и свойства

*Р. Смыслов¹, Г. Копица², Ф. Томилин^{3, 4}, И. Щугорева³, Г. Носова¹,
И. Березин¹, А. Якиманский¹, А. Кузубов³, С. Овчинников^{3, 4}*

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

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

³ *Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

⁴ *Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

Производство устройств, способных преобразовывать химические, либо химико-биологические воздействия в электрические и оптические сигналы, представляет сегодня важную научно-техническую задачу. Области применения – экологическая защита и техника безопасности, лабораторные исследования и экспресс-анализ, создания анализаторов для робототехники и различных электронных устройств. Практический интерес в качестве используемых в устройствах материалов имеют сопряженные полимеры на основе производных флуорена. Подходы к их получению и достижение технических характеристик связаны с решением фундаментальных задач наук о материалах. Отследить конформационные перестройки в сополифлуоренах от раствора до тонких плёнок и выяснить их влияние на окончательные фотолюминесцентные, хемо- и биосенсорные свойства материала – сложная научно-исследовательская проблема.

В работе на основе люминесцентных, структурных и квантово-механических подходов сделана попытка связать фотофизические характеристики синтезированных сополимеров флуорена с молекулярными взаимодействиями, влияющими на структуру материала. За основу использовали сополифлуорен, основная функциональная структурная единица которого представляет 4,7-бис(7-ил-9,9-диоктил-9Н-флуорен-2-ил)-2,1,3-бензотиадиазол. Для квантовохимических расчетов рассмотрена модель структурного звена, в котором алкильная группа – C_8H_{17} заменена на метильную. На первом этапе оценили возможные конформационные структуры сополифлуоренов в растворе. Для чего применяли метод малоуглового рассеяния рентгена (синхротрон PETRA 3, EMBL Hamburg, DESY), который позволил обнаружить структурные неоднородности для раствора сополифлуоренов в области переданных импульсов от 0,1 до 1 nm^{-1} .

Для полноатомного представления и сопоставления с экспериментальными (люминесцентными и структурными) данными использовали квантовохимические расчеты возможных конфигурационных и конформационных структур. Оптимизацию геометрии всех моделируемых структур проводили с использованием полуэмпирического метода PM6 в программе Морас2009; из набора получаемых атомных структур выбирали конформеры с наименьшей энергией, далее молекулы оптимизировали с использованием теории функционала плотности (DFT) [Kohn W.] и гибридного функционала B3LYP [Lee C, Becke A.] в базисе 6-31(p, d) [Frisch M. J.].

Жаропрочный композиционный материал на основе моноалюминида никеля, армированного частицами оксида алюминия

Р. А. Соколов, Ю. А. Абузин

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

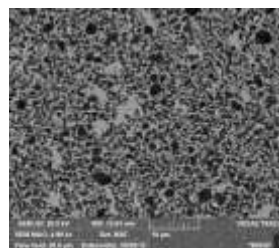
Материалы системы (Ni–Al) обладают высокими показателями удельной жаропрочности и жаростойкости, сопротивлением ползучести. При этом основным недостатком сплавов, является их невысокая пластичность при низких температурах. Преодолеть данный недостаток удалось в сплавах на основе Ni₃Al типа ВКНА, в которых задействованы механизмы создания гетерофазной структуры, твердорастворного упрочнения γ' - и γ -фаз легирующими элементами, формирование кристаллографической текстуры путем направленной кристаллизации и др. [1]. В материалах на основе NiAl, достичь существенного повышения пластичности при комнатной температуре не удалось. И несмотря на более высокую температуру плавления и более низкую плотность, чем у сплавов на основе Ni₃Al, для изготовления деталей, испытывающих механические нагрузки при высоких температурах, материалы не пригодны [2].

Основные этапы разработанной технологии получения композиционных материалов системы NiAl – Al₂O₃, включают испарение и конденсацию смеси порошков, отвечающих составу конечного композиционного материала. Это позволяет формировать материал с равномерным распределением дисперсных частиц оксида алюминия в объеме матрицы. Армирование нанокристаллическими частицами, согласно [3], приведет к повышению пластичности при комнатных температурах.

Получены лабораторные образцы композиционного материала NiAl, армированного Al₂O₃ (37 % об.), с помощью испарения, конденсации и последующей монолитизации смеси NiAl и Al₂O₃. Структура представлена на рисунке. Размер частиц колеблется от сотен нм до нескольких мкм, и тем не менее, структура однородна. Получить более дисперсную структуру возможно при изменении условий конденсации испаренной смеси. Увеличение объема реактора, в котором происходит испарение, будет способствовать уменьшению среднего размера частиц.



а)



б)

Структура композиционного материала на основе матрицы NiAl, армированной частицами Al₂O₃ при увеличении а) 200х, б) 5000х

1. К.Б. Поварова, О.А. Базылева и др., Конструкционные жаропрочные сплавы на основе Ni₃Al: получение, структура и свойства, *Материаловедение*, № 4 (2011).
2. В.П. Бунтушкин, Е.Н. Каблов и др., Сплавы на основе алюминидов никеля, *Металловедение и термическая обработка металлов*, №1 (1999).
3. А.И. Гусев, *Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства*, Екатеринбург: УрО РАН, 1998.

Диагностика и наноразмерная структура ряда сегнетоэлектрических материалов

*Г. Б. Сухарина¹, Н. Ю. Смоленцев¹, В. В. Сташенко², Б. К. Абдулвахидов¹,
А. А. Гуда³, К. Г. Абдулвахидов¹, А. В. Солдатов¹*

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

² Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

³ Международный исследовательский центр «Интеллектуальные материалы», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В настоящее время в мировой науке особая ниша отведена изучению сегнетоэлектрических материалов, которые используются в качестве активных элементов во многих функциональных устройствах. Одним из важнейших классов таких материалов являются сегнетоэлектрики-релаксоры. Свойства таких материалов могут значительно меняться без изменения химического состава за счет степени упорядочения катионов по эквивалентным кристаллографическим позициям. Данные материалы обладают уникальными электрофизическими и механическими свойствами, большой интерес представляю соединения типа $\text{PbTa}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}\text{O}_3$, $\text{PbTa}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$, $\text{PbNb}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$, $\text{PbCo}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_3$, $\text{PbSc}_{0,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_3$.

В данной работе отлажена методика синтеза сегнетоэлектриков семейства перовскита, вышеуказанных составов на основе метода механохимии и механоактивации. Проведена диагностика синтезированных материалов с использованием высокоэффективных методов: анализ поглощения излучения рентгеновского диапазона (XANES), рентгеновская дифракция (XRD), электронная микроскопия (SEM).

Выполнено компьютерное моделирование и теоретический анализ атомной и электронной структуры представленных в работе материалов, а также изучены электрофизические свойства в широком диапазоне частот и температур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-32-00589 мол_а.

Катионное и анионное упорядочение в структуре перовскита

М. В. Таланов¹, В. Б. Широков^{2, 1}, В. М. Таланов³

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

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

³ Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)
им. М. И. Платова, Новочеркасск, Россия

Структура перовскита ABX_3 допускает большие возможности для изо- и гетеровалентных замещений ионов во всех подрешетках в широком диапазоне размеров, поляризуемостей связей и других характеристик ионов и химических связей. В результате изоморфизма A -, B - и X -подрешетки перовскита могут содержать два (или больше) различных типа атомов, а также вакансии. В этом случае возникает возможность их упорядочения и, как следствие, появление качественно новых физических свойств у вещества. Изменения в степени порядка вызывают изменения оптических, магнитных и электрических (диэлектрических) свойств, электронной и ионной проводимости [1]. В настоящей работе теоретико-групповыми методами теории фазовых переходов решена задача перечисления всех возможных аристотипов (структур наивысшей симметрии) катионного и анионного порядков в перовскитах.

Установлена возможность существования по 13 фаз с упорядочением катионов в A -подрешетке и в B -подрешетках [2]. Обнаружено существование 121 фазы с одновременным упорядочением катионов в A - и B -подрешетках [3] и 261 фазы с анионным упорядочением в X -подрешетке [4]. Определены собственные и несобственные параметры порядка, в том числе и возможность проявления сегнетоэлектрических свойств в рассматриваемых структурах. Подробные результаты работы будут представлены в докладе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 16-32-60025 мол_а_дк и № 16-32-00144 мол_а.

1. P. K. Davies, Curr. Opin. Solid State 4, 467 (1999).
2. В. М. Таланов, М.В. Таланов, В.Б. Широков, Кристаллография 59 (5), 718 (2014).
3. М.В. Таланов, В.Б. Широков, В. М. Таланов, Кристаллография 59 (5), 731 (2014).
4. M.V. Talanov, V.B. Shirokov, V.M. Talanov, Acta Cryst. A 72, (2016).

Магнитные и микроволновые свойства твердых растворов $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ ($0,1 \leq x \leq 1,2$)

*А. В. Труханов^{1, 2}, С. В. Труханов², И. С. Казакевич², В. А. Турченко^{3, 4},
В. В. Олейник⁵, Е. С. Яковенко⁵, Л. Ю. Мацуй⁵, Л. Л. Вовченко⁵, В. Л. Лаунец⁵*

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

² *ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Минск, Беларусь*

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,
Донецк, Украина*

⁵ *Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина*

Методом порошковой рентгеновской дифракции определены параметры элементарной ячейки и уточнена кристаллическая структура твердых растворов гексагонального феррита бария М-типа $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ ($x = 0,1-1,2$) с диамагнитным замещением катионами Ga^{3+} при 300 К. Показано, что с ростом уровня замещения параметры элементарной ячейки монотонно уменьшаются. Образцы характеризуются гексагональной кристаллической структурой симметрии $R\bar{3}m$ [1–3]. Методом вибрационной магнитометрии исследованы температурные и полевые зависимости удельной намагниченности данных твердых растворов. Построена концентрационная зависимость температуры Кюри T_C , а также спонтанной намагниченности и коэрцитивной силы при 300 К. Показано, что с ростом уровня замещения магнитные параметры также уменьшаются. Исследованы микроволновые свойства рассматриваемых твердых растворов во внешнем подмагничивающем поле ($0 \text{ Oe} \leq H \leq 8 \text{ kOe}$). Показано, что с ростом концентрации катионов Ga^{3+} от $x = 0,1$ до $x = 0,6$ значение частоты естественного ферромагнитного резонанса вначале уменьшается, а при дальнейшем увеличении концентрации до $x = 1,2$ вновь растет. С увеличением концентрации катионов Ga^{3+} ширина линии естественного ферромагнитного резонанса возрастает, что указывает на увеличение частотного диапазона, где происходит интенсивное поглощение электромагнитного излучения. При этом амплитуда пика резонансной кривой изменяется незначительно. Сдвиг частоты естественного ферромагнитного резонанса во внешнем магнитном поле проходит более интенсивно для образцов с малыми концентрациями катионов Ga^{3+} . Показана перспективность и преимущество использования Ga-замещенного бариевого гексаферрита в качестве материала поглощающего высокочастотное электромагнитное излучение.

1. A.V. Trukhanov, V.O. Turchenko, et al., J. Magn. Magn. Mater. 393, 253 (2015).
2. С.В. Труханов, А.В. Труханов, и др., Письма в ЖЭТФ 103, 106 (2016).
3. А.В. Труханов, Н.Т. Данг, и др., ФТТ 58, 961 (2016).

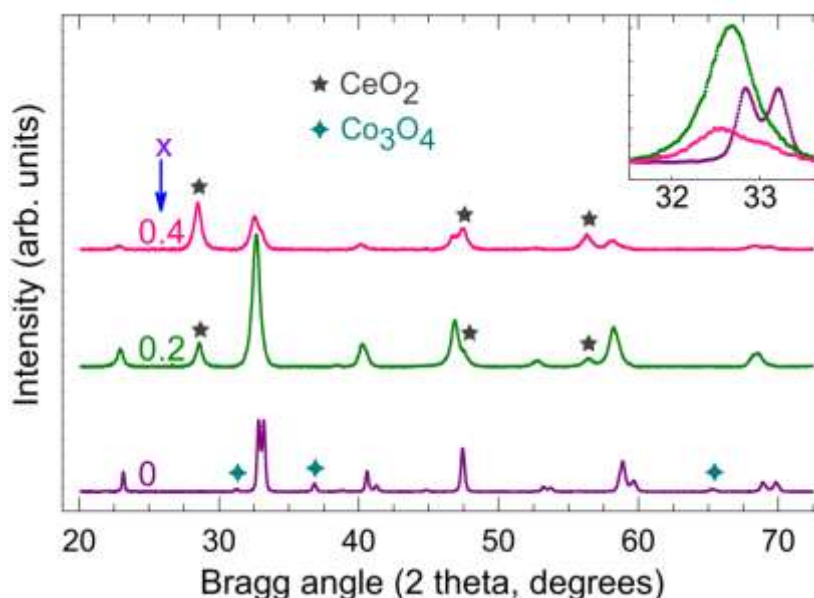
Preparation and characterization of $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CoO}_3$ perovskite oxides for energy materials

E. Uyanga^{1,2}, E. Nyamdavaa¹, G. Sevjidsuren¹, P. Altantsog¹

¹ *Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, Ulaanbaatar, Mongolia*

² *Joint Institute for Nuclear Research, Frank Laboratory of Neutron Physics, Dubna, Russia*

Cerium doped lanthanum cobaltite perovskites ($\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CoO}_3$ with $x = 0, 0.2, 0.4$) were prepared by the sol-gel method (calcined for 5h at 750 °C) and characterized by X-ray diffraction (XRD), X-ray absorption (XAS), Energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) and BET surface area analysis. Nanostructured $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CoO}_3$ with a crystallite size of 8–13 nm and a specific surface area of 2–5 m^2g^{-1} were prepared by sol-gel method. The XRD pattern of LaCoO_3 confirms the sample to be in rhombohedral phase. When cerium is doped the samples are found to be in cubic phase. An integration of all these results obtained in the best performance of the sample when $x = 0.2$. XAS investigations have proved the actual incorporation of Ce ions, possibly in forms of Ce^{3+} , into the perovskite. The results are in agreement with the increased lattice parameters and the evolution of the symmetry group into pseudo-cubic demonstrated by the XRD. These observations are correlated with the enhanced La–O ionic bond and changes in ionic/covalent Co–O bonding properties with increasing Ce doping concentration.



Comparison of simulated and experimental powder XRD patterns of $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CoO}_3$ samples. With the addition of cerium, mixed phases were expected

Механические свойства и термическая стабильность наноструктурированных покрытий $Zr(Y)O_2$, полученных с помощью реактивного ВЧ-магнетронного напыления

М. С. Филатов, С. А. Победа, О. В. Стогней

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Методом реактивного ВЧ-магнетронного распыления металлической сплавной мишени в смешанной среде ($Ar+O_2$) получены покрытия $Zr(Y)O_2$. Рентгенофазовый анализ полученных покрытий показал, что в ходе напыления происходит формирование диоксида циркония (ZrO_2) структура которого соответствует высокотемпературной кубической модификации. Стабилизация кубической фазы обусловлена наличием в металлической мишени примеси иттрия в количестве 15 ат. %, перенесенного в покрытие с таким же соотношением к цирконию (15 ат. %). Установлено, что изменение параметров напыления (давления Ar и O_2 , температуры подложки, плотности конденсирующегося атомного потока) не приводят к значительному изменению структуры, что говорит об определяющей роли примеси иттрия в процессе стабилизации высокотемпературной фазы диоксида циркония. Расчет размеров кристаллических зерен с помощью метода Дебая – Шеррера показал, что в процессе напыления формируются наноструктурированные покрытия (средний размер кристаллитов составил 60 нм). Для оценки величины адгезии наноструктурированных покрытий, которые должны выдерживать высокие значения деформации, возникающие при работе изделий и узлов с термобарьерными покрытиями из ZrO_2 , напыление производилось на никелевые образцы специальной формы для последующего испытания на растяжение в разрывной машине. Результаты испытаний показали, что наноструктурированное покрытие $Zr(Y)O_2$ не отслаивается от материала подложки и не разрушается вплоть до значительной пластической деформации никелевой основы. Визуальное отслоение и разрушение покрытия начиналось при нагрузке в 1300 кг, при этом относительная деформация всего образца составила 15 %. Более детальный анализ полученных данных показал, что образование трещин в покрытии без отслоения от подложки начиналось при относительной деформации никелевого образца равной 8,5 %.

Для проверки термической стабильности наноструктурированного состояния диоксида циркония проводились термические отжиги покрытий на никелевых подложках при температуре 1200 °С в воздушной среде. Рентгенодифракционный анализ образцов после нескольких циклов отжига, показал отсутствие изменений, как в размере кристаллитов, так и в их фазовом составе. Даже после многократных циклических отжигов (20 отжигов длительностью по 60 мин.), структура покрытия осталась неизменной, а само покрытие сохранило свою целостность.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-42-360778 p_a.

Исследование локальной атомной структуры металлоорганических фрактальных кристаллитов CuO_x методами XANES

А. О. Фуник, Г. Э. Яловега

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Тонкие пленки CuO_x были синтезированы золь-гель методом с использованием этиленгликоля в качестве растворителя. Изучение изменения формы металлоорганических кристаллитов, а также их локальной атомной структуры на различных этапах синтеза проводилось экспериментальными и теоретическими методами. Исследование морфологии поверхности осуществлялось с использованием сканирующей электронной микроскопии, что позволило установить прямую зависимость между температурой синтеза тонких пленок и формой кристаллитов, их образующих. Для того, чтобы описать механизмы роста кристаллитов, были использованы 2 теоретические модели: диффузионно-лимитирующей и кластер-кластерной агрегации. Метод рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES) был применен для описания изменений в локальном окружении атомов меди, изменений фазового состава и оксидного состояния кристаллитов Cu на различных этапах их роста. Было установлено, что при температурах синтеза до 250 °С фазовый состав представляет формируется из неразложившихся органических соединений меди. С увеличением температуры происходит изменение в локальной атомной структуре и в размере частиц в связи с тем, что большая часть вещества испаряется или сгорает. В результате описанных процессов образуется полнофрактальная кристаллическая структура.

Аномальный эффект Холла поликристаллических пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ ($x \sim 0,5$) с самоорганизованным распределением кристаллитов по размерам

*К. Ю. Черноглазов¹, С. Н. Николаев¹, В. В. Рыльков¹, А. Л. Васильев¹,
И. А. Лихачев¹, Н. К. Чумаков¹, А. В. Зенкевич², А. S. Semisalova³, S. Zhou³*

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

² *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

³ *Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Dresden, Germany*

Выполнены детальные исследования свойств нестехиометрических пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ ($x \approx 0,51-0,55$), полученных методом импульсного лазерного осаждения на подложках Al_2O_3 (0001) при 340°C в теневой геометрии (т. е. в условиях осаждения элементов при малой энергии за счет столкновения с атомами буферного газа Kr).

Пленки $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ при $x \approx 0,52$ демонстрируют высокотемпературный ферромагнетизм с температурой Кюри $T_C > 300$ К и при высоких $T \sim 300$ К положительного знака аномальный эффект Холла (АЭХ) [1, 2]. Обнаружено, что намагниченность образцов определяется двумя фазами: высокотемпературной с $T_C \approx 370$ К и низкотемпературной с $T_C \approx 46$ К, причем АЭХ с понижением температуры изменяет знак с положительного на отрицательный при температуре $30-50$ К, зависящей от толщины $\text{Mn}_x\text{Si}_{1-x}$ пленки.

Результаты объясняются структурной самоорганизацией поликристаллической пленки, в результате которой формируется два слоя с близкими значениями удельной проводимости и существенно отличающимися (≥ 10 раз) размерами кристаллитов. Обсуждаются особенности образования магнитных дефектов в этих условиях и их обмен через спиновые флуктуации по механизму [3].

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 15-07-01160, 16-07-00798 и 16-07-00657.

1. V.V. Rylkov, E.A. Gan'shina, O.A. Novodvorskii *et al.*, *Europhys. Lett.* 103, 57014 (2013).

2. V.V. Rylkov, A.S. Bugaev, O.A. Novodvorskii *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.*, 2015 383, 39–43.

3. V.N. Men'shov, V.V. Tugushev, S. Caprara *et al.*, *Phys. Rev. B* 83, 035201 (2011).

Анализ локальной атомной структуры наноструктур ZnS_xSe_{1-x}

А. И. Чукавин¹, Р. Г. Валеев¹, Я. В. Зубавичус², А. Л. Тригуб^{1,2}

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия*

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

На сегодняшний день большое внимание уделяется формированию наноструктур с заданной шириной запрещенной зоны как эффективному методу в конструировании полупроводниковых приборов. Наноструктуры на основе полупроводниковых соединений $A^{II}B^{IV}$ интенсивно изучаются из-за возможного применения в светоизлучающих диодах и фотодетекторах, работающих от синей до УФ областей спектра [1–4]. Как сообщалось в многочисленных публикациях, подбор размера наноструктур с использованием квантово размерного эффекта является общим подходом для изменения ширины запрещенной зоны в целях удовлетворения спроса желаемых приложений [5, 6]. Тем не менее, для некоторых конкретных применений для достижения желаемых свойств необходимы чрезвычайно маленькие наноструктуры, которые могут быть нестабильными. По этой причине, альтернативные подходы по изменению ширины запрещенной зоны сохраняют актуальность. Особый интерес представляют соединения типа $A^{II}B^{VI}_xS^{VI}_{1-x}$, в которых, варьируя содержание элементов типа В и С, можно контролируемо изменять ширину запрещенной зоны E_g материала.

В данной работе исследуемые образцы наноструктур ZnS_xSe_{1-x} были успешно синтезированы методом термического испарения смеси порошков сульфида и селенида цинка в сверхвысоком вакууме (не хуже 10^{-5} Па). В качестве подложки для напыления использовались мембраны пористого анодного оксида алюминия (ААО). Более подробно данный способ получения наноструктур описан здесь [7]. Исследования методами рентгеновской дифракции и XANES/EXAFS-спектроскопии были проведены с использованием синхротронного излучения на станции «Структурное материаловедение» (СТМ) в НИЦ «Курчатовский институт» (Москва). Особое внимание уделено изучению зависимости локальной атомной и параметров кристаллической структуры данных соединений от молярного отношения концентраций S/Se и от диаметра пор оксидной матрицы-носителя.

1. L. Hu, J. Yan, M. Liao, H. Xiang, X. Gong, L. Zhang, X. Fang, *Adv. Mater.* 24, 2305–2309 (2012).
2. S. S. Shinde, K. Y. Rajpure, *J. Alloys Comp.* 522, 118–122 (2012).
3. Q. Li, Y. Chen, L. Luo, L. Wang, Y. Yu, L. Zhai, *J. Alloys Comp.* 560, 156–160 (2013).
4. A.K. Shahi, B.K. Pandey, S.C. Singh, R. Gopal, *J. Alloys Comp.* 588, 440–448 (2014).
5. X. Zhao, C.M. Wei, L. Yang, M.Y. Chou, *Phys. Rev. Lett.* 92, 236805-4 (2004).
6. H. X. Chuo, T. Y. Wang, W. G. Zhang, *J. Alloys Comp.* 606, 231–235 (2014).
7. R. G. Valeev, E. A. Romanov, V. L. Vorobiev, V. V. Mukhgalin, V. V. Kriventsov, A. I. Chukavin, B. V. Robouch, *Mater. Res. Express* 2, 025006 (2015).

Спинодальный распад в эпитаксиальной пленке твердого раствора $\text{GaAs}_{0,7}\text{Se}_{0,3}$

М. Д. Шарков, М. Е. Бойко, А. В. Бобыль, А. М. Бойко, С. Г. Конников

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Проведено исследование спинодального распада в образце твердого раствора $\text{GaAs}_{0,7}\text{Se}_{0,3}$ – пленки, выращенной методом жидкофазной эпитаксии. Пленка была исследована в ФТИ им. А. Ф. Иоффе на установке MARC-2 [1] с помощью методики МУРР (малоугловое рассеяние рентгеновских лучей) с применением прикраевых значений длины волны анализирующего пучка [2]. Были получены кривые МУРР при излучениях с величинами длины волны 1,043 Å (11,89 кэВ) и 0,979 Å (12,66 кэВ), что незначительно короче значений для К-края As (11,87 кэВ) и Se (12,65 кэВ), а также при Cu $K_{\alpha 1}$ -излучении (1,5405 Å).

На основе полученных данных МУРР показано, что в образце произошел спинодальный распад твердого раствора $\text{GaAs}_{0,7}\text{Se}_{0,3}$ на отдельные фазовые компоненты GaAs и GaSe. Посредством сравнения данных МУРР, полученных при разных величинах длины волны, была установлена связь между размерами и химическим составом, двух разных типов однородных фаз, формирующих исследуемую пленку $\text{GaAs}_{0,7}\text{Se}_{0,3}$. Оказалось, что в пленке образуется мозаичная сверхструктура. Определены пространственные характеристики и химический состав двух разных типов фазовых компонент изучаемого образца: доменов GaAs (ячейки размером примерно 350*350*25 нм) и GaSe (ячейки примерно 350*350*15 нм). Показано, что исследуемый образец может включать в себя компоненты с линейной геометрией, не содержащие атомов мышьяка.

1. Sharkov M.D., Pogrebitsky K.Ju., Boiko M.E., Konnikov S.G. Advanced X-Ray Spectroscopy Involving Rotating Anode. // Precision Instrument and Mechanology. – 2012. – Vol. 1. – Num. 2. – P. 32–41.
2. Бойко М.Е., Шарков М.Д., Бойко А.М., Конников С.Г., Бобыль А.В., Будкина Н.С. Исследование атомной, кристаллической, доменной структуры материалов на основе анализа дифракционных и абсорбционных рентгеновских данных (обзор). // ЖТФ. – 2015. – №85. – Вып. 11. – С. 1–29.

Rotations and vibrations of water molecule inside the fullerene cage: infrared study of H₂O@C₆₀

A. Shugai¹, T. Rõõm¹, U. Nagel¹, S. Mamone², M. Concistrè², S. B. Meier²,
A. Krachmalnicoff², J. Whitby², M. H. Levitt², Xuegong Lei³, Yongjun Li³,
N. J. Turro³, Yasujiro Murata⁴, Tomoko Nishida⁴

¹ National Institute of Chemical Physics and Biophysics, Tallinn, Estonia

² University of Southampton Chemistry, Southampton, UK

³ University of Columbia, Dep. of Chemistry, New York, USA

⁴ Kyoto University, Institute for Chemical Research, Kyoto, Japan

Water is the second molecule after hydrogen what has been trapped inside the cage of a C₆₀ molecule by the molecular surgery method [1]. The water molecule rotation transitions were observed in the THz [2] and vibration-rotation transitions in the mid-IR range. The slow conversion between para (two proton spins couple to form a singlet, $I=0$) and ortho (triplet, $I=1$) water allowed us to record the time evolution of spectra and to separate ortho and para absorption lines of water. The exact mechanism of the ortho to para conversion is still not fully understood, and we studied the relaxation process at different temperatures and concentration of H₂O@C₆₀ in order to clarify the kinetics. The similarity of the rotation spectrum of caged water to water in the gas phase indicates that water is free to rotate in the C₆₀ cage even at temperature as low as 3K. However, spectral lines show a splitting of about 0.5 meV what is not compatible with the icosahedral symmetry of C₆₀. Different models (e.g. crystal field effects in solid C₆₀, C₆₀ cage distortions) will be discussed.

1. K. Kurotobi, Y. Murata, "A Single Molecule of Water Encapsulated in Fullerene C₆₀", *Science*, 333 (6042), 613-616 (2011).

2. Beduz et al., "Quantum rotation of *ortho* and *para*-water encapsulated in a fullerene cage" *PNAS* 109 (32), 12894 (2012).

Зарядовое упорядочение и магнитные свойства в наноразмерных порошках $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$

М. В. Ярмолич¹, Н. А. Каланда¹, С. Е. Демьянов¹, В. А. Турченко^{2, 3}

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

² Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка Объединенного института
ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,
Донецк, Украина

В полуметаллических ферромагнетиках $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ наблюдается многообразие магнитных состояний, которые обусловлены взаимосвязью орбитальных, зарядовых, спиновых степеней свободы. При образовании антиструктурных дефектов типа $[\text{Fe}_{\text{Mo}}]$, $[\text{Mo}_{\text{Fe}}]$ катионы железа могут находиться в различных спиновых состояниях. Меняя их концентрацию можно влиять на перераспределение электронной плотности, формируя новое зарядовое упорядочение. Это означает что спиновым состоянием катионов Fe и Mo можно управлять путем введения антиструктурных дефектов [1, 2].

Цитрат-гель методом при pH=4, 6, 9 были получены однофазные наноразмерные порошки $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ с различной концентрацией антиструктурных дефектов. Согласно данным РФЭС анализа в полученных порошках установлено смешанное валентное состояние катионов железа и молибдена, причем с увеличением pH концентрация Fe^{2+} растет, а концентрация Fe^{+3} , соответственно, падает. Согласно данным температурных зависимостей намагниченностей, выполненных в ZFC и FC режимах, установлено нестабильное суперпарамагнитное состояние при $T < 19$ К. Обнаружено, что внешнее магнитное поле стимулирует переход в наноразмерных зернах из метастабильного суперпарамагнитного состояния в стабильное выше некоторого значения индукции магнитного поля, превышающей по величине минимальное поле анизотропии. При этом в порошках при pH=4, количество наноразмерных зерен больше, чем в pH=6, 9, что обусловило их большую намагниченность при $T=(4,2-19)$ К.

1. C.L. Yuan, S.G. Wang, W.H. Song et al., Appl. Phys. Lett. 75, 3853 (1999).
2. N.A. Kalanda, L.V. Kovalev, J.C. Waerenborgh et al., SAM. 7, 446 (2015).

**Определения размера и формы макромолекул альфа-кристаллина
и системы альбумин + ПАВ в растворе
методом малоуглового рентгеновского рассеяния**

С. В. Амарантов

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

Метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР, SAXS) предоставляет уникальную возможность изучать структуру достаточно крупных биологических наночастиц в растворе, с размерами макромолекул существенно превышающих возможности метода ядерного магнитного резонанса и при этом не требующей какой-либо специальной подготовки образцов. В работе представлены кривые рассеяния от слабо полидисперсного раствора олигомерного белка альфа-кристаллина и обработка его кривой рассеяния развитыми в данной работе методами. А именно, выделение основной фракции в экспериментальную кривую рассеяния от слабо-полидисперсной системы и использование в качестве модели белка фрактально-однородного формфактора эллипсоида. Другим объектом исследования в данной работе являются поверхностно-активные вещества (ПАВ) вблизи критической концентрации мицеллообразования ККМ. Методы рассеяния дают незаменимую структурную информацию, позволяющую изучать полиморфизм мицелл, а также механизм взаимодействия системы белок-ПАВ.

Целью работы является определить размер и структуру агрегатов белка и бычьего сывороточного альбумина BSA, при различной концентрации ПАВ, методом МУРР. Данные полученные из МУРР эксперимента дают представление о взаимном влиянии белка BSA и ПАВ различного типа (анионного SDS, катионного DTAB) в широкой области концентраций ПАВ. А именно для системы BSA с додецилсульфатом натрия (SDS) происходит разворачивания макромолекулы альбумина. Установлено что белок индуцирует образование мицеллоподобных агрегатов вдоль развернутой полипептидной цепи.

При добавлении ПАВ к раствору из взаимодействия полярных групп белка и ПАВ вначале формируется гидрофобный комплекс. При этом глобула белка остается компактной. С ростом концентрации ПАВ и денатурации белка наиболее часто формируется модель комплекса белок + ПАВ типа «ожерелье и бусинки». Модель предполагает, что полипептидная цепь в растворе является гибкой, и мицеллоподобные кластеры ПАВ располагаются вдоль развернутой пептидной цепи.

Влияние наночастиц цинка на обменные процессы у мышей

*Я. В. Бородулин¹, М. Д. Матасов², Е. Г. Чеботарева¹, О. Э. Лосев¹,
Ю. С. Чесовских¹, В. Б. Бородулин¹, Е. В. Бобылева¹*

¹ *Саратовский государственный медицинский университет им. В. И. Разумовского, Саратов, Россия*

² *Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Пероральное введение наночастиц цинка в концентрациях 1–100 мкг/20 г вызывает значительное изменение в концентрации метаболитов, отражающих состояние углеводного обмена и обмена гемопротеинов. Наиболее выраженным биологическим действием обладают наночастицы в концентрации 25–50 мкг/20 г. Высокая биологическая активность цинка обусловлена тем, что он в качестве кофактора является структурным компонентом ряда ферментов, участвующих в синтезе нуклеиновых кислот (ДНК-полимеразы, ДНК-зависимой РНК-полимеразы, аспарат-транскарбамилазы, тимидинкиназы и др.) [1].

Необходимо отметить, что концентрация альбуминовой фракции при этом у экспериментальных животных колеблется в пределах значений у контрольной группы.

Следовательно, диспротеинемия может быть обусловлена развитием воспалительного процесса под действием наночастиц цинка и как результат увеличением концентрации фракции глобулинов. Введение мышам суспензий наночастиц цинка способствовало незначительному увеличению креатинина в крови ($p > 0,05$). При введении наночастиц в концентрации 1 мкг/20 г содержание креатинина увеличилось на 5 %, при дозировке 25 мкг/20 г – на 15 %. Уровень содержания мочевины в сыворотке крови мышей, подвергшихся действию наночастиц цинка, значительно отличался от показаний в контрольной группе ($3,53 \pm 0,06$ ммоль/л) и носил дозозависимый характер.

Таким образом, можно предположить, что наночастицы цинка оказывают менее токсинное действие на почки, чем на другие органы. Анализ выявленных изменений биохимических параметров сыворотки крови позволил прийти к заключению, что при пероральном введении наночастицы цинка в концентрациях 1–100 мкг/20 г оказывают биологическое действие, которое проявляется в значительном изменении концентрации метаболитов, отражающих состояние углеводного обмена и обмена гемопротеинов. Необходимо отметить, что наиболее выраженным биологическим действием обладают наночастицы в концентрации 25–50 мкг/20 г, что говорит о большей доступности таких дозировок для организма.

1. Lonnerdal B. Effects of milk and milk components on calcium, magnesium and trace elements absorption during infancy // *Physiological Reviews*. - 1997. - vol. 77. - №. 3. - p. 643-669.

Анализ зависимости совместной устойчивости везикулы и вытянутой из нее трубчатой липидной мембраны от кривизны липидного бислоя

И. Ю. Голушко, С. Б. Рошаль

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В работе проведен теоретический анализ экспериментов по исследованию трубчатых липидных мембран (ТЛМ), в ходе которых сформированные из липидной везикулы путем вытягивания липидные трубки стабилизируются при помощи молекул белков или амфифильных полимеров [1, 2]. Внедряясь в верхний слой липидов, полимеры изменяют спонтанную кривизну бислоя. В результате стабилизированные ТЛМ оказываются устойчивыми и в случае отсутствия внешней растягивающей силы.

Предложенная в работе модель совместного равновесия ТЛМ и везикулы наряду с переменной спонтанной кривизной липидного бислоя, учитывает перепад давления между внутренней и внешней областями системы. Энергия ТЛМ описывается выражением:

$$\Phi = \frac{k}{2} \int \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - 2C_0 \right)^2 dS + \sigma \int dS - \Delta P \int dV - FL \quad (1)$$

где k – изгибная жесткость мембраны, C_0 – средняя спонтанная кривизна мембраны, R_1 и R_2 главные радиусы кривизны, σ – коэффициент поверхностного натяжения, ΔP – разность давлений внутри и снаружи ТЛМ. L – ее длина, а F – приложенная вдоль оси сила. dV и dS – дифференциалы объема и площади соответственно. При этом энергия сферической везикулы определяется аналогичным выражением, с той лишь разницей, что в нем отсутствует член FL , а $R_1=R_2=R_{\text{везикулы}}$.

На плоскости эффективных безразмерных параметров $\alpha_F = \frac{Fr}{\pi k}$ и $\alpha_C = 2C_0 r$, характеризующих соответственно приведенную среднюю спонтанную кривизну и приведенную растягивающую силу, найдена область устойчивости индивидуальной ТЛМ. Анализ совместного равновесия везикулы и вытянутой из нее ТЛМ показывает, что равновесие этой системы реализуется на некоторой кривой в пространстве $\langle \alpha_F, \alpha_C \rangle$, заканчивающейся в точке неустойчивости Эйлера типа. В работе продемонстрировано, что в окрестности этой точки два разных по симметрии типа мод липидной нанотрубки одновременно являются критическими. Также обоснована возможность экспериментального наблюдения исследованной неустойчивости.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-12-10004.

1. A. Roux, G. Koster, M. Lenz et al., PNAS, Vol. 107, No. 9, 4141-4146, (2010).
2. B. Sorre, A. Callan-Jones, J. Manzi et al., PNAS, Vol. 109, No. 1, 173-178, (2012).

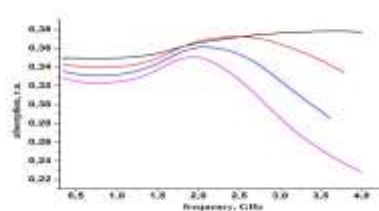
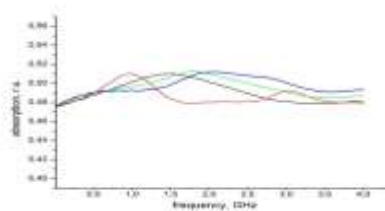
Исследование поглощения электромагнитных волн моделью живой ткани

Д. А. Калганов, Д. А. Павлов, А. А. Федий, А. П. Анзулевич

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Электромагнитное излучение (ЭМИ) различной частоты широко используются в биологии и медицине. В связи с этим представляется актуальным изучение взаимодействия ЭМИ с живой тканью в широком диапазоне частот от сотен мегагерц (УВЧ-терапия) до десятков гигагерц (микроволновая гипертермия). Особое внимание в последние годы уделяется исследованиям возможности применения локальной гипертермии при лечении опухолевых и неопухолевых заболеваний с введением таргетных ферромагнитных препаратов [1]. При этом появляется возможность равномерного нагрева областей с большими размерами, повышения глубины, локализации и лучшего контроля степени нагрева. Большинство из этих исследований все еще находятся на ранней стадии вследствие сложности расчета поглощения электромагнитного излучения в тканях с большими значениями диэлектрической проницаемости и содержанием ферромагнитных частиц [2].

В данной работе исследовано поглощение электромагнитного излучения диапазона 10 МГц – 4 GHz системой из диэлектрической матрицы $\epsilon_r = 80$ (модель живой ткани на основе желатина) со случайным статистически-равномерным распределением в ней ферромагнитных микрочастиц (карбонильное железо). Экспериментально и теоретически (метод конечных элементов) получены зависимости коэффициента поглощения от объемной доли ферромагнитных частиц в диапазоне 0–50 %. Теоретически исследована зависимость коэффициента поглощения от размера ферромагнитных частиц.



Зависимость коэффициента поглощения ЭМИ от концентрации ферромагнитных частиц 10–50 % (слева) и их размера $r = 1–5$ мкм (справа)

Полученные зависимости указывают на наличие широкого максимума поглощения в диапазоне электромагнитного излучения 1–2,5 GHz. Наибольшее поглощение наблюдается для образцов с 30 % объемной доли ферромагнитных частиц. С уменьшением размеров частиц, происходит расширение максимума поглощения и его сдвиг в область высоких частот.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 15-07-08111.

1. K. T. Noell et al., Cancer, 45, 4 (1980). 638-646.
2. G. F. Baronzio, Introduction. Hyperthermia In Cancer Treatment. A Primer. Medical Intelligence Unit. Berlin. Springer. (2006). P. 20.

Принципы формирования вирусных капсидов с двойными белковыми оболочками

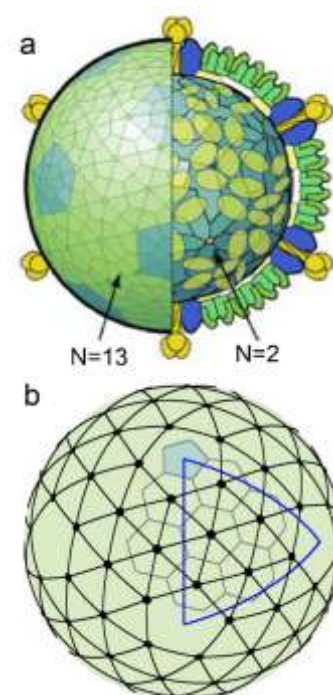
О. В. Коневцова¹, С. Б. Рошаль¹, В. Л. Лорман²

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

² Laboratoire Charles Coulomb, CNRS – Université Montpellier 2, Montpellier, France

Несмотря на то, что структуры значительного количества вирусных капсидов интерпретируются в рамках геометрической модели Каспара и Клуга (КК), существует ряд экспериментально разрешенных структур малых вирусов не соответствующих данной модели. Выдвинутые ранее геометрические и физические идеи, объясняющие устройство подобных капсидов, основаны на предложенных КК симметричных принципах, но отрицают в целом классическую геометрическую модель. Мы не отказываемся от этой модели, а лишь предлагаем ее некоторую модификацию. В традиционной модели КК в узлах сферических решеток размещаются капсомеры. Модифицированная модель основана на тех же самых сферических решетках, однако в отличие от традиционной модели, в модифицированной модели в решеточных узлах с тривиальной локальной симметрией размещаются асимметричные протеины, а узлы с нетривиальной симметрией остаются вакантными.

Предложенный подход не только проясняет принципы структурной организации капсидов малых вирусов, как удовлетворяющих, так и не удовлетворяющих КК модели, но и позволяет объяснить устройство вирусных капсидов с двойными белковыми оболочками. Рассмотрен пример капсида реовируса (а), в котором внутренняя оболочка с $N=2$ попадает под область применимости модифицированной модели (b), а внешняя с $N=13$ (b) – традиционной модели КК. Так как обе модели построены на схожих геометрических принципах, они могут применяться совместно, в том числе для моделирования структур пока еще неоткрытых двойных вирусных оболочек. Высокая степень структурной организации и соразмерность устройства подобных двойных капсидов гарантируется тем, что обе оболочки основываются на одной и той же сферической решетке.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 15-12-10004).

Анализ воздействия наночастиц меди на биохимические показатели сыворотки крови у мышей

*М. Д. Матасов¹, Я. В. Бородулин², Е. Г. Чеботарева², О. Э. Лосев²,
Ю. С. Чесовских², В. Б. Бородулин², Е. В. Бобылева²*

¹ *Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

² *Саратовский государственный медицинский университет им. В. И. Разумовского, Саратов, Россия*

Пероральное введение наночастиц меди в концентрациях 1–100 мкг/20 г вызывает значительное изменение в концентрации общего белка, креатинина и мочевины. Наиболее выраженным биологическим действием обладают наночастицы меди в концентрации 25–50 мкг/20 г.

Ранее была установлена высокая физиологическая активность нанопорошков металлов, что может характеризовать их как экологически чистые биологически активные препараты [1].

Нанопорошок меди был синтезирован на плазмохимическом комплексе. Средний размер наночастиц колебался в пределах 50–80 нм.

В процессе работы было выявлено, что медные частицы обладают биодоступностью и способны проникать из желудочно-кишечного тракта в кровь, переноситься с током крови к различным органам и оказывать биологический эффект, который проявляется также в изменении биохимических показателей сыворотки крови.

Наночастицы меди в диапазоне концентраций 1–100 мкг/20 г оказывают выраженное действие на обменные процессы, при этом наиболее подвержен действию наночастиц обмен белков, что проявляется в увеличении концентрации общего белка за счет глобулиновых фракций (развиваются воспалительные процессы), происходит увеличение концентрации креатинина вследствие распада белков и снижение синтеза мочевины вследствие возможного повреждающего действия частиц на гепатоциты.

Наиболее выраженным биологическим действием из исследуемых концентраций наночастиц меди обладают наночастицы в концентрации 25–50 мкг/20 г, что вероятно, обусловлено их большей биологической доступностью по сравнению с другими дозировками. Вероятно самых малых концентраций (1 мкг/20 г) недостаточно для проявления выраженного биологического эффекта, а высокие дозы частиц (100 мкг/20 г) приводят к частичному слипанию частиц в конгломераты, что снижает их биодоступность.

1. Федоров Ю.И. Высокодисперсные порошки металлов – новый класс биологически активных препаратов. Автореф. докт. дис. – М. – 1983, 26 с.

Распределение радионуклидов в питьевой воде центральной зоны Азербайджана

А. Дж. Микаилова

Институт радиационных проблем НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

Радиоактивность питьевой воды вызвана присутствием естественных и техногенных радионуклидов в реках и озерах, а также в подземных источниках воды (подпочвенные воды, артезианские колодцы и родники). Радиационная опасность питьевой воды зависит от состава и удельной объемной активности естественных и техногенных радионуклидов.

Самыми опасными техногенными радионуклидами являются стронций-90, цезий-134 и цезий-137. Значительная часть стронция-90 проникает в скелет человека. Вследствие чрезвычайно медленного удаления стронция из организма человека возникает источник облучения костного мозга. Значительные уровни ^{137}Cs были получены при испытаниях ядерного оружия и теперь откладываются на Земле в виде выпадения радиоактивных осадков.

Радионуклиды, дают информацию для исследования процессов, происходящих в природе, особенно для установления механизма смешивания поверхностных и подземных вод. В результате экологических процессов в окружающей среде, грунтовые воды смешиваются в водах рек и каналов. Радионуклидный анализ структуры грунтовых вод, вод рек и каналов дает возможность получить информацию о загрязнении окружающей среды и геологической системы.

Речная вода загрязнена воздействием человеческих факторов и в результате дренажа соленых грунтовых вод в равнинных областях увеличивается соленость, химическая структура становится сложной и изменяется тип воды. Такое положение наблюдается в Ширване. В водах Куры, протекающей через Мил-Карабахскую низменность, так же, как и непосредственно в Куре и реке Араз.

Приготовление проб воды и проводилось по стандартной методике. Пробы были помещены в мензурку Маринелли. Для достижения радиоактивного равновесия пробы содержались в закрытой мензурке Маринелли в течение приблизительно одного месяца, и затем был накоплен гамма-спектр каждой пробы. Для измерения радиоактивности был использован гамма-спектрометр с высокочувствительным Ge-детектором, управляемый программным обеспечением Genie 2000 (производство фирмы КАНБЕРРА). Для всех проб был выбран идентичный режим измерения, продолжительность накопления спектра составляла 24 часа. В результате исследований были определены значения и распределения радионуклидов в центральных областях Азербайджана.

Использование наночастиц магнетита для повышения контраста МР изображений опухолей головного мозга

*М. А. Парр¹, Я. Ю. Марченко², Б. П. Николаев², Л. Ю. Яковлева²,
М. А. Шевцов³, В. А. Рыжов⁴*

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

² Государственный научно-исследовательский институт особо чистых биопрепаратов, Санкт-Петербург, Россия

³ Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Поведение наночастиц магнетита (НМ) размером до 30 нм при комнатной температуре соответствует суперпарамагнитному режиму [1]: во внешнем поле магнитные моменты НМ выстраиваются вдоль направления поля, а после его выключения разупорядочиваются за счет тепловых флуктуаций без сохранения какой-либо остаточной намагниченности. Водные суспензии суперпарамагнитных НМ находят применение в качестве средств негативного контраста для МРТ диагностики. Присутствие НМ в опухолевой ткани ускоряет ЯМР релаксацию протонов в ней, что проявляется в затемнении опухоли на томограмме. Для обеспечения адресной доставки НМ в опухоль их конъюгируют с биологически активными лигандами. В работе исследованы магнитные свойства конъюгатов НМ с белком теплового шока (БТШ70) в водных суспензиях и возможность их использования в качестве контрастирующих агентов для диагностики опухолей мозга.

Наночастицы оксида железа, полученные в результате копреципитации солей железа, были покрыты декстраном и конъюгированы с БТШ70. В качестве модели опухоли использовалась крысиная глиома, созданная с помощью интракраниальной инъекции клеток С6.

Отсутствие полевого гистерезиса НМ в зависимостях от статического поля сигнала второй гармоники намагниченности продольного нелинейного отклика на слабое ac поле ($f \approx 16$ МГц) при комнатной температуре свидетельствовало о суперпарамагнитном режиме НМ в водных суспензиях. Тем же методом была подтверждена избирательность накопления конъюгатов НМ с БТШ70 в организме [2]. Накопление конъюгатов НМ с БТШ70 в опухолях после внутривенного введения крысам было подтверждено МРТ исследованиями [3]. В результате работы показана возможность использования конъюгатов суперпарамагнитных НМ с БТШ70 для контрастирования опухолей.

1. B.D. Gullity, C.D. Graham. Introduction to Magnetic Materials. IEEE Press, Wiley, New York. 2009.

2. Shevtsov M.A., Nikolaev B.P., Ryzhov V.A. et al. Brain tumor magnetic targeting and biodistribution of superparamagnetic iron oxide nanoparticles linked with 70-kDa heat shock protein study by nonlinear longitudinal response. JMMM, 388, p. 123-134. 2015.

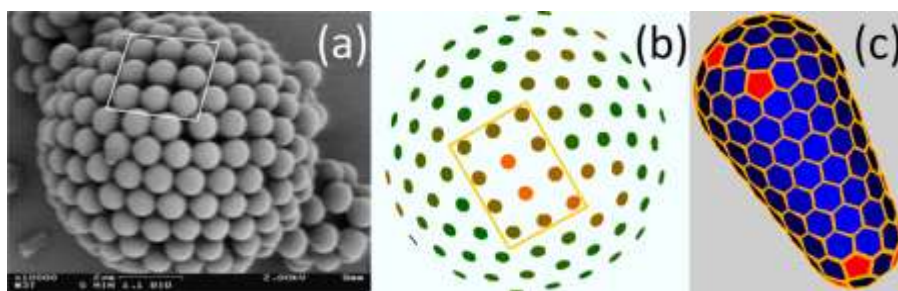
3. Shevtsov M.A., Yakovleva L.Y., Nikolaev B.P. et al. Tumor targeting using magnetic nanoparticle Hsp70 conjugate in a model of C6 glioma. *Neuro Oncol*, p. 38-49. 2014.

Моделирование самосборки сферических коллоидных кристаллов и капсида вируса иммунодефицита человека

Д. С. Рошаль, О. В. Коневцова, С. Б. Рошаль

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Коллоидные кристаллы (КК) получают в результате самосборки коллоидных частиц на сферической границе раздела двух жидкостей. КК могут использоваться как проницаемые наноконтейнеры для адресной доставки лекарств [1]. На поверхности сферических КК с достаточно большим числом частиц существует гексагональный порядок с 12 протяженными топологическими дефектами. Чаще всего это цепочки частиц, имеющих по 5 и 7 ближайших соседей, однако встречаются и более сложные дефекты (рис. а, б). При моделировании структуры КК [1–4] обычно считается, что коллоидные частицы удерживаются на 2D границе раздела и взаимодействуют друг с другом парным потенциалом отталкивания. Если при этом используется Кулоновский потенциал, задача сводится к решению проблемы Томсона [3].



Экспериментальный сферический коллоидный кристалл – (а); его модель – (b); модель структуры капсида созревшего вируса ВИЧ – (с)

Большинство вирусов также имеют сферическую форму, но в отличие от КК характеризуется точной икосаэдрической симметрией и топологическими дефектами минимального размера – точечными дисклинациями (пентамерами). В процессе созревания ВИЧ внутри сферической липидной оболочки укрепленной белками матрицы удивительным образом собирается конусообразный капсид (рис. с), характеризуемый несимметричным расположением 12 пентамеров. Некоторые из биологических теорий образования конического капсида предполагают, что он растет на белках нуклеокапсида с опорой на внешнюю сферическую оболочку и внутренний геном. Воспользовавшись известной математической моделью самосборки КК на подложке, мы смоделировали самосборку капсида ВИЧ и получили расположение белков, напоминающее экспериментальные данные.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №15-12-10004).

1. D. S. Roshal, ФТТ **55**, 2012 (2013).
2. D.S. Roshal, K.Yu. Petrov, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, Phys. Lett. A. **378**, 1548 (2014).
3. D.S. Roshal, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal. Phys. Lett. A. **379**, 372 (2015).
4. D.S. Roshal, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, Physica E, **75**, 295 (2016).

Исследование структурных изменений в растворах липидных мембран под гидростатическим давлением

*М. И. Рулев^{1, 3}, А. И. Куклин^{1, 2}, А. И. Исламов¹, П. К. Утробин²,
Д. В. Соловьев^{1, 2, 4}, А. И. Иваньков^{1, 2, 4}, В. И. Горделий^{5, 6}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

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

⁴ Институт проблем безопасности АС, Киев, Украина

⁵ Institute of Structural Biology, Grenoble, France

⁶ ICS-6, Forschungszentrum Juelich, Germany

Для исследования сурфактантных, биологических и модельных липидных мембран требуется относительно невысокое давление – до нескольких кбар. Интерес же к исследованиям под давлением именно с использованием нейтронов связан прежде всего с их высокой проникающей способностью.

Известно, что водный раствор 1,2-димиристоил-сн-глицеро-3-фосфатидилхолина (ДМФХ) при нормальных условиях главный фазовый переход происходит при температуре около 24 °С [1]. Изменение давления приводит к смещению точки фазового перехода в сторону больших температур. В работе представлены результаты исследования растворов мультислойных и однослойных липидных мембран, приготовленных на основе ДМФХ, под гидростатическим давлением до 2 кбар. Измерения проведены на малоугловом спектрометре ЮМО [2] (реактор ИБР-2, ОИЯИ, Дубна). Обнаружено, что зависимость изменения точки главного фазового перехода имеет линейный характер. Коэффициент наклона кривой, характеризующий изменение температурной точки главного фазового перехода как функции давления, составляет 0,013 °С/бар. Проведено сравнение с другими литературными данными. Причины имеющихся различий в коэффициенте наклона кривой обсуждаются.

1. Д.В.Соловьев et al. (2011). Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, №1, стр.11-14.

2. Kuklin et al. (2005). Neutron News, 16(3), 16-18.

Измерения содержания и изотопных соотношений благородных газов, отобранных из конжеляционного льда озера Восток

*Ю. О. Четвериков¹, Н. Н. Аруев⁵, С. А. Булат¹, К. А. Груздов⁴, В. Ф. Ежов¹,
Ф. Жан-Батист², И. Л. Каменский⁶, В. Я. Липенков³, Э. М. Прасолов⁴,
В. А. Соловей¹, Р. В. Тюкальцев⁵, И. Л. Федичкин⁵*

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

² *Le Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, Saclay, France*

³ *Арктический и антарктический научно-исследовательский институт,
Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Всероссийский научно-исследовательский геологический институт,
Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *Кольский научный центр РАН, Апатиты, Россия*

Исследованы изотопные соотношения благородных газов: гелия, неона и аргона в газовых пробах, полученных дегазацией кернов намерзшей на ледник воды озера «Восток». Керны извлечены с глубин 3596–3699 метров скважины 5Г-3 станции Восток, Восточная Антарктида. Лёд кернов является сверхчистым и содержит относительно малое количество растворенных газов. Газы отобраны в стеклянные колбы в течение трех дней дегазации кернов, только что поднятых из скважины. Пробы исследовались на масс-спектрометрах благородных газов MAP-215-50 (LSCE, СЕА Сакле, Франция), Micromass' NG-5400 (ВСЕГЕИ, С-Пб) и MI 1201 (ГИ КНЦ РАН, Апатиты) через 9–15 месяцев после пробоотбора.

Изотопные соотношения $\text{He}^3/\text{He}^4=0.28\pm 0.08R_a$ ($R_a=1.38\cdot 10^{-6}$ - He^3/He^4 отношение для воздуха) в пределах ошибки соответствуют измеренным в работе [1]. Найденное в пробах отношение $\text{He}^4/\text{Ne}^{20}=3.5$, так же как и $\text{Ar}^{40}/\text{Ar}^{36}=297.7$ превышает воздушное значение ($\text{He}^4/\text{Ne}_a=0.29$; $\text{Ar}^{40}/\text{Ar}^{36}_a=295.6$). Полученные данные по соотношениям $\text{He}^4/\text{Ne}^{20}$ и $\text{Ar}^{40}/\text{Ar}^{36}$ указывают на значительный вклад терригенного газа в газовый баланс озера и на высокое содержание древних подземных вод в озере. Тогда как малое отношение He^3/He^4 говорит о низком потоке мантийного He^3 , близком к зонам континентальных платформ далеко от активных рифтовых зон.

1. Philippe Jean-Baptiste et al. Constraints on hydrothermal processes and water exchange in Lake Vostok from helium isotopes Letters to nature, 411, 460-462 (2001).

Исследование структурной организации хроматина в ядре живой клетки методами нейтронного рассеяния

Е. Г. Яшина^{1, 2}, Е. В. Величко³, 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

³ Delft University of Technology, Delft, The Netherlands

Молекулы ДНК имеют диаметр 2 нм, но их длина в хромосомах может достигать нескольких сантиметров. Очевидно, что упаковка таких длинных молекул в объеме клеточного ядра, имеющего диаметр всего 5–8 мкм, должна быть в высшей степени регулярной. Проблема укладки молекул ДНК в ограниченном объеме ядра осложняется еще и тем, что одновременно необходимо обеспечить возможность локальной распаковки ДНК и доступа к ней ферментов репликации и транскрипции. Эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов демонстрируют бифрактальную структуру молекулы ДНК [1, 2]. В данной работе были исследованы образцы изолированных интерфазных ядер куриных эритроцитов методом СЭМУРН (рис. 1) и МУРН (рис. 2). Оба метода продемонстрировали, что корреляционная функция исследуемого объекта $\gamma(r)$ пропорциональна $\ln(\xi/r)$, где $\xi = 3,4$ мкм – его корреляционная длина. Это свидетельствует о том, что хроматин на масштабах от 100 нм до 1,2 мкм имеет иерархически разветвленную структуру, что обеспечивает доступность ферментов к нужным участкам генов.

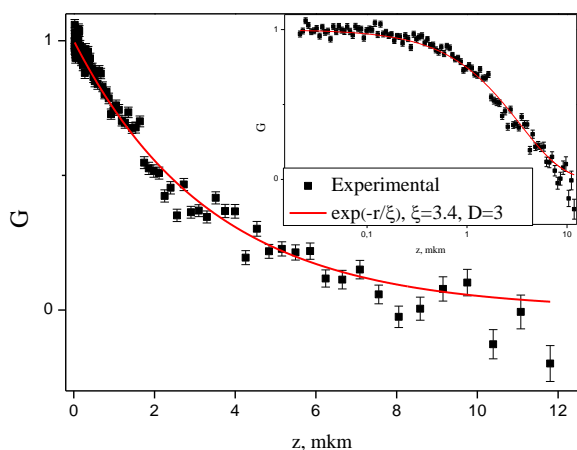


Рис. 1. Значение спин-эхо корреляционной функции G в зависимости от спин-эхо длины z для ядер куриных эритроцитов

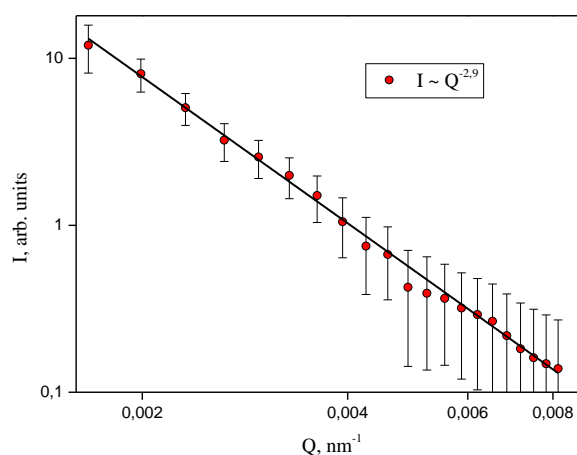


Рис. 2. Зависимость интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов от переданного импульса на образцах ядер куриных эритроцитов

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 14-22-01073 офи_м).

1. D.V. Lebedev, M.V. Filatov, A.I. Kuklin, A.Kh. Islamov, E. Kentzinger, R. Pantina, B.P. Toperverg, V.V. Isaev-Ivanov, FEBS Letters, 579 (2005), 1465–1468.

2. A. V. Ilatovskiy, D. V. Lebedev, M. V. Filatov, M. G. Petukhov and V. V. Isaev-Ivanov, Journal of Physics: Conference Series 351 (2012) 012007.

Электрон-фононное взаимодействие в квантовом диске

Р. Г. Абасзаде¹, Г. Б. Ибрагимов¹, А. А. Алиев¹, Д. В. Якимчук²

¹ *Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

² *ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь*

Быстрый прогресс в технологиях микрофабрикации естественным образом привел к идее туннелирования через трехмерно ограниченные структуры квантовых точек [1–3]. Вследствие того, что электроны ограничены поперечно и вертикально в этих структурах, они становятся предметом большого интереса как с точки зрения физики явлений переноса, так и изготовления устройств с высоко интегрированным функциональным резонансным туннелированием. Созданы структуры само сборных дисков [4, 5], были вычислены электронные уровни в приближении эффективной массы и адиабатическом приближении. Feng Chi и др. [6] исследовали влияние поперечных подзон, вызванных квантованным движением в плоскости дисков, на плотность тока во всей структуре. Теоретически большинство работ по КТ фокусируются на сферических КТ и только несколько работ по прямоугольным и цилиндрическим КТ или по квантовым дискам. Фактически, в то время как микрокристаллиты приблизительно сферические, КТ лучше описываются тонким диском [7] или цилиндрами [8, 9].

Мы теоретически изучаем взаимодействие между электронами и фононами в квантовом диске. Множитель электронно - ПА фононного взаимодействия, возникающий вследствие перекрытия электронных и фононных волновых функций,

задается в виде
$$I_{n,t,0;n'r'0} = \int_0^R |\Psi_i(r)|^2 |\Psi_f|^2 r dr,$$
 который зависит только от

начальных/конечных электронных состояний. По этому уравнению может быть вычислена электронная подвижность, ограниченная фононами.

1. Y.S. Joe, D.S. Ikeler, R.M. Cosby, Characteristics of transmission resonance in a quantum-dot superlattice, J.Appl.Phys. 88 (2000) 2704-2708.
2. Y.Suda, H.Koyama, Electron resonant tunneling with a high peak-to-valley ratio at room temperature in Si_{1-x}Ge_x/Si triple barrier diodes, Appl.Phys.Lett. 79 (2001) 2273-2275.
3. T.Bryllert et.al., Transport through an isolated artificial molecule formed from stacked self-assembled quantum dots, Appl.Phys.Lett. 82 (2003) 2655-2657.
4. M. Korkusinski and P. Hawrylak, Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks, Phys. Rev. B 63 195311 (2001).
5. J.-L.Lui et.al., Electronic structure of coupled vertically stacked self-assembled InAs quantum disks in a vertical electric field, Superlatt.Microstruct. 33 (2003) 29-40.
6. Feng Chi, Jing-Lin Xiao, Shu-Shen Li, Electronic transport through self-assembled quantum disks. Superlatt.Microstruct 35 (2004) 59-65.
7. K.Kash, A.Scherer, J.M.Worlock, H.G. Graighead, M.C. Tamargo, Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum wells, Appl. Phys. Lett. 49 (1986) 1043-1045.
8. M.A.Reed, J.N.Randall, R.J. Aggarwal,R.J.Matyti, T.M. Moore, A.E. Wetsel, Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure, Phys.Rev.Lett., 60 (1988) 535-537.
9. H.E.G.Arnot,M. Watt,C.M.Sotomayor-Torres, R.Giew, R.Cusco,J.Bates and S.P. Beaumont, Photoluminescence of overgrown GaAs-GaAlAs quantum dots, Superlatt. Microstruct. 5 (1989) 459-463.

О характеристике сегнетоматериалов с высоким СВЧ-поглощением электромагнитного излучения

А. Г. Абубакаров¹, Я. А. Рейзенкинд¹, М. Б. Мануилов², Ю. М. Нойкин²

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

² Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия

Радиопоглощающие материалы (РПМ) – это композиционные материалы, состав и структура которых обеспечивает эффективное поглощение электромагнитной энергии в определённом диапазоне длин волн. Анализ литературных данных показал, что ни в одной публикации нет полного единого описания параметров, характеризующих СВЧ – поглощение объектов.

Целью данной работы является выбор параметров, по которым можно оценить диссипативные свойства объектов и оценка изменения диссипативных свойств в зависимости от частоты.

В качестве таких параметров рассматриваются элементы нормированной волновой матрицы рассеяния СВЧ четырехполюсника (отрезка микрополосковой линии, на которую может накладываться исследуемый образец) и связанные с ними величины [1, 2].

Для четырехполюсника без потерь выполняется закон сохранения энергии и $|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1$. При наличии потерь энергии в четырехполюснике $|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 < 1$ и отличие суммы $|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2$ от единицы может служить мерой потерь в четырехполюснике.

На первом этапе измерялись частотные зависимости модулей $|S_{21}|$ и $|S_{11}|$ для МПЛ без исследуемого образца. Затем аналогичным образом измерялись частотные зависимости модулей $|S_{21}|$ и $|S_{11}|$ МПЛ с наложенным образцом. Разность величин $|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2$ соответствующих МПЛ без образца и с образцом может служить мерой потерь в исследуемом образце.

Далее производим расчеты по следующим формулам:

Пусть элементы матрицы рассеяния МПЛ без образца S_{ij}^0 , а элементы матрицы рассеяния МПЛ с образцом S_{ij} .

Полные потери МПЛ без образца $\alpha_0 = 1 - |S_{11}^0|^2 - |S_{21}^0|^2$.

Полные потери МПЛ с образцом $\alpha_1 = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2$.

Дополнительные потери, возникающие при наложении образца на линию $\alpha = \alpha_1 - \alpha_0 = (1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2) - (1 - |S_{11}^0|^2 - |S_{21}^0|^2) = |S_{11}^0|^2 + |S_{21}^0|^2 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2$.
С использованием данной методики можно установить потери, в широком частотном диапазоне для композиционных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ: базовая и проектная части гос. Задания (тема № 1927, Задание № 3.1246.2014/К. проект № 213.01-2014/012ВГ).

1. Фельдштейн А.Л., Явич Л.Р. Синтез четырехполюсников и восьмиполусников на СВЧ. Изд.: «Связь». 1971. -388 с.

2. Сазонов Д.М. Антенны и устройства СВЧ. Изд.: Высшая школа. 1988. – 432 с.

Теоретическое исследование низкотемпературной теплоемкости одностенных и двустенных углеродных нанотрубок, взаимодействующих с окружением

М. В. Авраменко, С. Б. Рошаль

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Развивается недавно предложенная континуальная модель [1, 2] низкочастотной динамики одностенных и двустенных углеродных нанотрубок, взаимодействующих с окружением. В рамках модели рассмотрена связь между низкочастотными фоннными спектрами двух одностенных углеродных нанотрубок и фоннным спектром образуемой ими двустенной нанотрубки. Показано, что влияние окружения и взаимодействие между одностенными трубками наиболее существенно сказываются на модах, частоты которых стремятся к нулю вместе с волновым вектором. Коэффициенты ван-дер-Ваальсова взаимодействия между слоями двустенной нанотрубки оценены на основе спектроскопических данных и по известным величинам упругости графита. В рамках разработанного подхода рассчитана низкотемпературная удельная теплоемкость одностенных и двустенных углеродных нанотрубок. Показано, что окружение более существенно влияет на низкочастотный фоннный спектр одностенных углеродных нанотрубок и при сверхнизких температурах ($T < 2$ К) вызывает уменьшение их удельной теплоемкости более чем на порядок. Установлено, что теплоемкость двустенной углеродной нанотрубки значительно меньше, чем сумма теплоемкостей двух образующих ее невзаимодействующих одностенных нанотрубок. При этом основной причиной данного эффекта является взаимодействие не с окружением, а между слоями двустенной нанотрубки.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №15-12-10004).

1. S. B. Rochal, V. L. Lorman, Yu. I. Yuzyuk, Phys. Rev. B 88, 235435 (2013).
2. M. V. Avramenko, I. Yu. Golushko, A. E. Myasnikova, S. B. Rochal, Phys. E 68, 133 (2015).

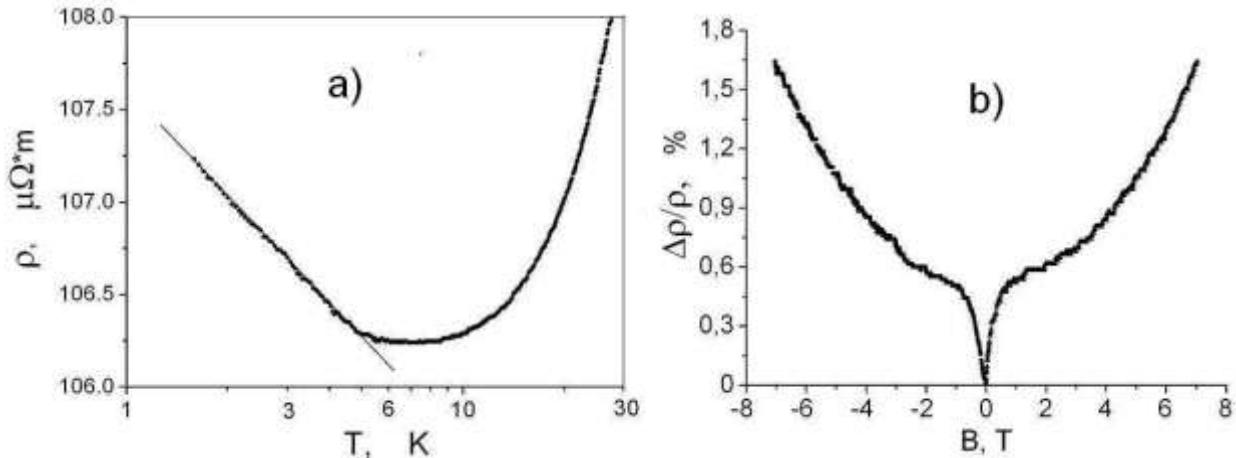
Квантовые интерференционные эффекты в тонких пленках $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$

Х. В. Алигулиева, Н. А. Абдуллаев

*Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

Тонкие плёнки твёрдых растворов $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ привлекают внимание не только наибольшими показателями термоэлектрической эффективности [1, 2], но и с точки зрения позиционирования их в качестве топологических изоляторов (ТИ). Примечательной особенностью зонной структуры ТИ является то, что носители в поляризованных по спину поверхностных состояниях практически не рассеиваются на дефектах поверхности. Это обусловлено тем, что обратное рассеяние носителей заряда в такой зоне на немагнитных примесях запрещено симметрией относительно инверсии времени. Тонкие плёнки являются удобными модельными объектами для исследования вклада поверхностных состояний в общий транспорт электронов вследствие повышенного соотношения роли поверхности к объёму [3].

В настоящей работе представлены результаты исследования электрических и гальваномагнитных эффектов (магнитосопротивление и эффект Холла) в отожжённых тонких плёнках твёрдых растворов $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ в широкой области температур 1,2–300 К и магнитных полей до 8 Т.



Наблюдаемые одновременно два эффекта: а) увеличение сопротивления с уменьшением температуры при низких температурах ($T < 8$ К) и б) резкий рост магнитосопротивления при малых магнитных полях ($B < 1$ Т) можно объяснить электрон-электрон взаимодействием в квазидвумерных системах и сильным спин-орбитальным взаимодействием при доминирующей роли поверхностных состояний ТИ.

1. R. Venkatasubramanian *et al.*, Nature **413**, 591 (2001).
2. Л.В.Прокофьева, Д.А.Пшеная-Северин, П.П.Константинов, А.А.Шабалдин, ФТП **43**, 1009 (2009).
3. Y. S. Kim *et al.*, Phys.Rev.B **83**, 073109 (2011).

Голографический подход к описанию высокотемпературной сверхпроводимости

С. С. Афонин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Теоретическое описание явления высокотемпературной сверхпроводимости до сих пор остается нерешённой задачей. Одна из идей состоит в том, что в основе явления лежит сильная связь, которая делает неприменимым язык фононов, лежащий в основе теории Бардина-Купера-Шриффера для обычной сверхпроводимости. Недавно в теории поля и в теории струн появились плодотворные идеи о том, как описывать системы с сильной связью, для которых неприменима теория возмущений и квазиклассика, - так называемый голографический подход. В последние годы появилось множество работ по приложениям данного подхода к физике конденсированного состояния, в частности, для описания высокотемпературной сверхпроводимости. В лекции будет дано введение в голографический подход, рассказано про простейшую модель описания сверхпроводимости в рамках этого подхода и про достигнутый прогресс в данном направлении.

Holographic Superconductivity

A. A. Blatov

Independent University of Moscow, Moscow, Russia

In this paper we apply the AdS/CFT correspondence to condensed matter physics, we used it for the application to theory of superconductivity [1–4]. We start by analysing the “ordinary” 2+1 dimensional holographic superconductor where we only have a scalar field coupled to an Einstein-Maxwell theory in the bulk. After this we add corrections to the theory by higher derivative terms in the action which allows us to interpolate vortex excitations in the superconductor. In particular we find that we are able to tune the energy gap in the weakly coupled BCS and find that we can produce behaviour of conductivity at low frequencies [5]. Also in this paper we view how add a magnetic field to 3+1 superconductors for new brane solutions [6, 7].

1. J. M. Maldacena, “The large n limit of superconformal field theories and supergravity”, *Adv.Theor.Math.Phys*, (1998).
2. S. A. Hartnoll, C. P. Herzog and G. T. Horowitz, “Building a Holographic Superconductor” *Phys. Rev. Lett.* (2008).
3. S. A. Hartnoll, C. P. Herzog and G. T. Horowitz, “Holographic Superconductors” *JHEP* (2008).
4. S. Sachdev, “What can gauge-gravity duality teach us about condensed matter physics?”, *Ann. Rev. of Cond. Mat. Phys.* (2011).
5. A. Ritz, J. Ward, “Weyl corrections to holographic conductivity”. *Phys.Rev.D* (2008).
6. M. Ammon, J. Erdmenger, M. Kaminski and P. Kerner “Flavor Superconductivity from Gauge/Gravity Duality” *JHEP* (2009).
7. K. Peeters, J. Powell and M. Zamaklar, “Exploring colourful holographic superconductors” *JHEP* (2009).

Магнитная структура аморфных сплавов системы Re-Gd

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфного гадолиния и аморфных сплавов (АС) $\text{Re}_x\text{-Gd}_{100-x}$ ($x = 12, 37, 61, 93$ ат. %), содержащие по 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось эмпирическим полиномиальным потенциалом.

Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследовались магнитные свойства построенных моделей. Гамильтониан, описывающий взаимодействие магнитных моментов атомов гадолиния, был записан в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1(S_i \cdot S_j) - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_2(S_i \cdot S_k), \quad (1)$$

где $J_1 = 45,7$ К – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми не превышает r_1^{\min} 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} – первым и вторым минимумами парной функции радиального распределения $g(r)$.

Для модели аморфного Gd были рассчитаны функции $G(r)$ при различных значениях $J_1/|J_2|$ и температуре $T = 1$ К. В спин-стекольной фазе функции $G(r)$ осциллируют на больших расстояниях, что свидетельствует как о положительных, так и отрицательных корреляциях в расположении магнитных моментов атомов Gd. В асперомагнитном состоянии функция $G(r)$ монотонно убывает с ростом расстояния между спинами.

Для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 12, 37, 61, 93$ ат. %) рассчитаны функции $G(r)$ при $J_1/|J_2| = 10$ и температуре $T = 1$ К, соответствующей состоянию спинового стекла. Функции $G(r)$ также имеют осциллирующий характер.

Для всех исследуемых моделей рассчитаны угловые спиновые корреляционные функции $P(\theta)$, характеризующие локальное магнитное упорядочение в данных системах. Функции $P(\theta)$ имеют четко выраженный максимум, угловое положение которого монотонно уменьшается с увеличением отношения $J_1/|J_2|$. С увеличением температуры максимум на кривых $P(\theta)$ смещается в сторону больших углов.

Квантово-классический кроссовер вблизи квантовой критической точки

М. Г. Васин^{1, 2}, В. Н. Рыжов², В. М. Винокур³

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия*

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

³ *Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA*

Представление d -мерной квантовой системы с помощью $(d+1)$ -мерной классической статистической механики является одним из центральных приёмов теории квантовых фазовых переходов (КФП), особенно в области сильного конечномерного скейлинга вблизи квантовой критической точки (ККТ) [1–3]. Дополнительным измерением здесь является мнимое время, отражая тот факт, что квантовое описание динамично по своей сути. Тем не менее, такой подход применим только к недиссипативной квантовой динамике, в то время как вопрос о том, как диссипативные процессы должны быть включены в описание критической динамики вблизи ККТ, до сих пор тщательно не изучен. В данной работе мы приводим общий подход, позволяющий описывать как адиабатические, так и диссипативные процессы в критической динамике. Мы выявили вблизи ККТ три различных критических режима: адиабатический квантовый режим (АКР), диссипативный (классический) критический режим (ДКР), и диссипативный квантовый критический режим (ДККР). Мы полагаем, что в результате перехода d -мерной системы из диссипативного режима, в котором доминируют тепловые флуктуации, в режим, в котором преобладают квантовые флуктуации, система приобретает эффективную размерность $d+2$. Нам удалось рассчитать непрерывную зависимость критических показателей от температуры при квантово-классическом кроссовере [4]. Наши выводы приводят к созданию единой картины квантовых критических явлений, учитывающей как диссипативную, так и бездиссипативную динамику системы, и позволяют дать количественное описание квантово-классического кроссовера.

1. S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini & D. Shahar, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 315-333 (1997).

2. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Second Edition. Cambridge university press (2011).

3. S. M. Stishov, *Phys. Usp.*, **47**, 789 (2004).

4. M. G. Vasin M.G., V. N. Ryzhov, V. M. Vinokur, *Scientific Reports*, **5**, 18600 (2015).

Теоретическое описание критической динамики перехода жидкость – стекло

М. Г. Васин

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

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

В представленной работе переход жидкость-стекло описывается с помощью методов неравновесной критической динамики. В основе предложенного подхода лежат два положения: Предполагается, что система находится во флуктуационной области вблизи предполагаемого фазового перехода второго рода, $T \rightarrow T_c^+$, т. е. в системе существуют и усиливаются флуктуации, представляющие собой спонтанно возникающие и разрушающиеся упорядоченные области; 2. Система фрустрирована, что, напротив, препятствует росту флуктуаций упорядочения. В [1, 2] было показано, что результатом наложения этих условий в итоге является замораживание системы при ее охлаждении в неупорядоченном неэргодическом твердом состоянии, т.е. в состоянии стекла, при температуре $T_0 > T_c$.

В представленной работе с помощью предложенной калибровочной теории стекольного перехода описываются кинетические свойства стеклюющихся систем. На временной корреляционной функции, $G(t)$, при $T \rightarrow T_0^+$ теория воспроизводит характерное плато [1]. Его возникновение вызвано критическим замедлением динамики коллективного движения в областях, ограниченных радиусом упругого взаимодействия. Рассеяние на этих областях вырезает низкочастотную часть динамического структурного фактора $S(\omega)$, что приводит к появлению на нем характерного для стеклюющихся систем «бозонного пика», ω_{BP} [3].

Кроме того, показано, что кинетика релаксации стеклюющихся систем, описываемых данной теорией, является недебайевской, а их динамические корреляционные функции могут быть аппроксимированы, например, формулой Кольрауша, $G(t) \approx \exp[-t/\tau^\beta]$ ($0 < \beta < 1$).

Работа поддержана грантом РФФИ 14-02-00359.

1. M. G. Vasin, J. Stat. Mech., P05009 (2011).
2. М. Г. Васин, Теоретическая и математическая физика, 174, 3, 406–420 (2013).
3. M. G. Vasin, Journal of Non-Crystalline Solids, 387, 139–142 (2014).

Ab initio расчеты электронной структуры Tl_3PS_4

В. Т. Ву, А. А. Лаврентьев, Б. В. Габрельян, П. Н. Шкумат

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

Ab initio проведен квантовомеханический расчет электронно-энергетической структуры (ЭЭС) в фосфорсодержащем сульфиде Tl_3PS_4 . Парциальные плотности электронных состояний, рассчитанные с помощью программного пакета WIEN2k [1], хорошо соответствуют полученным ранее рентгеновским K - и $L_{2,3}$ -спектрам серы и фосфора. Расчеты ЭЭС проводились в рамках теории функционала плотности модифицированным методом присоединенных плоских волн. Использовался полный потенциал, зависящий от орбитального момента и внутри, и вне атомных сфер. В расчете использовалось приближение GGA+U [2] с $U = 7.08$ эВ для $5d$ -состояний Tl, что привело к смещению $5d$ -полосы Tl в сторону больших энергий связи. Использовался также модифицированный потенциал Беке-Джонсона [3]. Кроме того, проводился расчет спин-орбитального расщепления [4], для чего выбиралось направление намагниченности вдоль $[001]$. Учет такого взаимодействия в расчете привел к появлению двух узких расщепленных полос $5d$ -состояний Tl с $j = 5/2$ и $j = 3/2$, совпадающих с пиками на рентгеноэлектронном спектре Tl_3AsSe_3 [5]. Согласно [6], Tl_3PS_4 имеет $E_g = 2,3$ эВ. Результат проведенного расчета дал $E_g = 2,28$ эВ для Tl_3PS_4 .

Из комбинированной плотности состояний (JDOS) и матричных элементов вероятности перехода электрона между валентной зоной и зоной проводимости были рассчитаны диагональные компоненты $\varepsilon^{xx}(\omega)$, $\varepsilon^{yy}(\omega)$, и $\varepsilon^{zz}(\omega)$ мнимой части диэлектрического тензора второго ранга вдоль кристаллографических осей \vec{a} , \vec{b} , и \vec{c} . Действительная часть диэлектрической функции $\varepsilon_1(\omega)$ была получена из мнимой части $\varepsilon_2(\omega)$ с помощью соотношения Крамерса-Кронига. Все другие оптические характеристики, такие как коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$, показатель преломления $n(\omega)$, коэффициент экстинкции $k(\omega)$, оптический коэффициент отражения $R(\omega)$ и спектр энергетических потерь $L(\omega)$, были выведены из $\varepsilon_1(\omega)$ и $\varepsilon_2(\omega)$.

1. P. Blaha, et al. WIEN2k – Techn. Uni. Wien, Austria, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
2. V.I. Anisimov, I.V. Solovyev, et al. Phys. Rev. B, 48, 16929 (1993).
3. F. Tran, P. Blaha, Phys. Rev. Lett., 102, 226401 (2009).
4. J. Kuneš, P. Novák, et al. Phys. Rev. B 64, 153102 (2001).
5. M.D. Ewbank, S.P. Kovalczyk, et al. Phys. Rev. B 24, 7565 (1981).
6. Д.М. Берча, Ю.В. Ворошилов, В.Ю. Сливка, И.Д. Турияница. Сложные халькогениды и халькогалогениды. – Львов: Вища школа, 1983. – 181 с.

Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры InPS₄

В. Т. Ву, А. А. Лаврентьев, Б. В. Габрельян, П. Н. Шкумат, Б. Б. Кулагин

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

В настоящей работе проведены *ab initio* расчеты электронно-энергетической структуры (ЭЭС) InPS₄ в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением базиса присоединенных плоских волн и добавлением локальных орбиталей (L)APW+lo, что реализовано в программном пакете WIEN2k [1]. Для расчета обменно-корреляционного потенциала использовались приближение обобщенного градиента (GGA) [2] и модифицированный потенциал Becke-Johnson (mBJ) [3]. В дополнение к вышеуказанным обменно-корреляционным потенциалам в расчетах ЭЭС проводился учет сильного кулоновского взаимодействия d-электронов на одном узле через введение параметра U. Таким образом, в окончательном варианте использовались модели обменно-корреляционного потенциала PBE+U и MBJ+U [4] с U=0.5 Ry. Рассчитанные парциальные плотности электронных состояний в InPS₄ хорошо соответствуют по форме и энергетическому положению отдельных элементов соответствующим экспериментальным аналогам – рентгеновским K- и L_{2,3}-спектрам эмиссии S и P (получены ранее Лаврентьевым А. А.). Рассчитанная полная плотность электронных состояний (DOS) также хорошо соответствует экспериментальному рентгеноэлектронному спектру (XPS) из [5]. Отдельно проводились расчеты рентгеновских спектров поглощения P и S как с учетом дырки на внутреннем K-уровне, соответственно, фосфора и серы, так и без ее учета. Только с дыркой удалось достичь очень хорошо соответствия формы и отдельных тонких элементов структуры по энергии с полученными ранее экспериментальными рентгеновскими спектрами поглощения S и P.

В работе удалось рассчитать для InPS₄ запрещенную полосу $E_g=3.429$ эВ, которая согласуется с экспериментальным значением, равным 3.44 эВ [6]. При использовании пакета *tetra-elastic* [7] в рамках WIEN2k-кода были рассчитаны независимые упругие константы (C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} , C_{66}) в InPS₄, значения которых хорошо соответствуют экспериментальным значениям для них [8].

На основании расчета комбинированной плотности состояний (JDOS) и матричных элементов вероятности перехода электрона между валентной зоной и зоной проводимости получена мнимая часть $\epsilon_2(\omega)$ тензора диэлектрической проницаемости в InPS₄. С помощью соотношений Крамерса-Кронига из $\epsilon_2(\omega)$ рассчитывалась действительная часть диэлектрической функции $\epsilon_1(\omega)$. Далее все другие оптические характеристики, такие как коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$, показатель преломления $n(\omega)$, коэффициент экстинкции $k(\omega)$, оптический коэффициент отражения $R(\omega)$ и спектр энергетический потерь $L(\omega)$ были выведены из $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$.

1. P. Blaha et al. WIEN2k – Techn. Uni. Wien, Austria, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
2. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett., 77, 3865 (1996).
3. F. Tran, P. Blaha, Phys. Rev. Lett., 102, 226401 (2009).
4. V.I. Anisimov, I.V. Solovyev et al. Phys. Rev. B, 48, 16929 (1993).
5. G. Hollinger, C. Estrada et al. J. Microsc. Spectrosc. Electron. 13, 31 (1988).
6. E. Yu Peresh et al. Khimia i khimicheskaya tekhnologiya 21, 1070 (1978).
7. A. H. Reshak, M. Jamal, Int. J. Electrochem. Sci., 8, 12252 – 12263 (2013).
8. W. Jantz, P. Koidl et al. Appl. Phys. A., 30, 109-115 (1983).

Фотоиндуцированный спиновый ток в двухтерминальном квантовом кольце

А. А. Григорькин, С. М. Дунаевский

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

В последние годы квантовые кольца привлекают пристальное внимание, поскольку характерные для них эффекты, связанные с интерференцией электронных волновых функций, позволяют создавать эффективные спиновые фильтры. Важную роль при этом играет спин-орбитальное взаимодействие, позволяющее реализовать схему управления спиновой поляризацией посредством электрического поля. Геометрия кольца удобна и для изучения взаимодействия электронов с оптическим излучением. В данной работе мы рассматриваем спин-поляризованные токи, возникающие под действием циркулярно-поляризованного излучения в структуре, состоящей из 1D квантового кольца Рашбы с двумя присоединенными проводниками. Кольцо находится в постоянном магнитном поле, направленном перпендикулярно к его плоскости.

Поглощение поляризованного излучения в кольцевых структурах может сопровождаться возникновением в присоединенных проводниках постоянного электрического тока. Этот фотоиндуцированный ток существует в отсутствие разности потенциалов и обусловлен преобразованием момента импульса фотонов в импульс поступательного движения электронов. Электрический ток равен нулю в системах, имеющих центр инверсии. Однако при наличии спин-орбитальной связи Рашбы в центросимметричной системе отличен от нуля фотоиндуцированный спиновый ток, представляющий собой два потока электронов, равных по величине и противоположных по направлению и ориентации спина. Ток выражается через коэффициенты отражения и прохождения электрона с учетом неупругого взаимодействия с излучением. Он пропорционален интенсивности излучения и сложным образом зависит от магнитного потока через кольцо и константы спин-орбитальной связи.

При наличии разности потенциалов через систему протекает баллистический ток, спиновая поляризация которого зависит от величины магнитного потока через кольцо. При этом взаимодействие с излучением может существенно повысить спиновую поляризацию баллистического тока. Подобрав мощность излучения, можно обратить в ноль одну из поляризованных компонент тока, получив 100% спиновую фильтрацию.

Об уравнении собственных колебаний двух смежных дислокационных сегментов

В. В. Дежин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Рассмотрены два смежных отрезка бесконечной прямолинейной дислокации, совершающие малые колебания под действием внешней силы. Линия дислокации располагалась вдоль оси Oz , смещение точек дислокационной линии $\xi(z, t) = 0$ при $z \in (-\infty, -L_1] \cup \{0\} \cup [L_2, \infty)$, где t – время, L_1 и L_2 – длины дислокационных сегментов. Исследование основывалось на уравнении колебаний дислокации, полученном в работе [1]. Для решения задачи смещение дислокации и внешняя сила представлялись в виде рядов в представлении стоячих волн. Для амплитудного спектра смещений дислокационной линии найдено матричное уравнение

$$\begin{pmatrix} Q^{(1)}(\omega) \\ Q^{(2)}(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^{(1,1)}(\omega) & B^{(1,2)}(\omega) \\ B^{(2,1)}(\omega) & B^{(2,2)}(\omega) \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} F^{(1)}(\omega) \\ F^{(2)}(\omega) \end{pmatrix},$$

где матрицы $F^{(1)}$ и $F^{(2)}$ – коэффициенты разложения в ряд внешней силы, матрицы $B^{(n,k)}$ – матричные элементы дислокационных осцилляторов [2], ω –

частота. Следовательно, блочная матрица $\begin{pmatrix} B^{(1,1)} & B^{(1,2)} \\ B^{(2,1)} & B^{(2,2)} \end{pmatrix}^{-1}$ является функцией

линейного отклика двух смежных дислокационных сегментов. Уравнение, определяющее собственные частоты колебаний этих сегментов, имеет вид

$$\det \begin{pmatrix} B^{(1,1)}(\omega) & B^{(1,2)}(\omega) \\ B^{(2,1)}(\omega) & B^{(2,2)}(\omega) \end{pmatrix} = 0.$$

Согласно известной формуле [4] запишем это равенство в виде произведения определителей обычных матриц $|B^{(1,1)}| |B^{(2,2)} - B^{(2,1)}(B^{(1,1)})^{-1}B^{(1,2)}| = 0$, где $|B^{(1,1)}| \neq 0$. Таким образом, получим уравнение собственных колебаний двух смежных дислокационных сегментов $|B^{(2,2)} - B^{(2,1)}(B^{(1,1)})^{-1}B^{(1,2)}| = 0$.

1. И.Л. Батаронов, В.В. Дежин, А.М. Рошупкин. Изв. РАН. Сер. Физ. Т. 57. № 11. С. 97. (1993).
2. И.Л. Батаронов, В.В. Дежин. Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий: сб. тр. VIII Междунар. конф. Воронеж: Научная книга. С. 54. (2015).
3. Ф.Р. Гантмахер. Теория матриц. М.: Наука. (1966).

Расчет напряжения внешнего магнитного поля ИОПС

М. Г. Дудник

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

На сегодняшний день инвертированные опалоподобные структуры (ИОПС) являются не только интересным объектом для бесчисленного множества измерений их физических свойств, но и перспективным материалом для изучения микромагнетизма.

ИОПС представляет из себя заполненные пустоты, образованные полистирольными шариками, расположенными в ГЦК решётке. Позже сами шарики (например, $d = 540$ нм) вытравливаются толуолом. Для заполнения используется переходный металл, обычно Ni или Co.

В работе [1] было обнаружено, что в 3d-плёнке ИОПС наблюдается логарифмическая зависимость коэрцитивной силы от числа слоёв в плёнке.

Подобная зависимость была теоретически предсказана в [2] для халбаховских цилиндра и сферы. Где магнитное поле зависит логарифмически от отношения внешнего и внутреннего радиусов.

Автором тезисов был произведён теоретический расчёт напряжения внешнего магнитного поля вблизи образца через градиент от магнитостатического потенциала, исходя из рассуждений аналогичных статье [2].

1. I. S. Shishkin, A. A. Mistonov et al. Nonlinear geometric scaling of the coercivity in a three-dimensional nanoscale analogue of spin ice. PRL B, (2016). [В редакции]
2. K. Halbach, Nucl. Instr. and Meth. 169 (1980) 1.

Топологически защищенные экситоны в комплексах металлофталоцианинов

Л. В. Ельникова

*ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Фталоцианины с центральным ионом металла, или металлофталоцианины (МРС) [1], часто классифицируются как органические полупроводники благодаря их проводящим свойствам, которые заключаются, в том числе, в возникновении при определенных условиях топологически нетривиальных экситонных токов, что позволяет применять МРС в устройствах спинтроники, нанофотоники и пр. [2, 3]. Природа появления краевых бездиссипативных экситонных токов в образцах МРС объясняется пространственной конфигурацией молекул МРС, обладающих группой симметрии D_{4h} и организуемых на двух различных подрешетках. Рентгеноструктурные методы анализа [4, 5], оптические измерения [6] и др. свидетельствуют о геометрии решетки МРС и о существенном влиянии экситонных токов на спектры поглощения МРС.

В настоящей работе для оценки величины запрещенной зоны и термодинамических параметров отдельных МРС переходных металлов численно исследуется 3D решеточная модель в приближении сильной связи в неоднородном магнитном поле.

1. Г.В.Шапошников, В.П.Кулинич, В.Е.Майзлиш. Модифицированные фталоцианины и их структурные аналоги/ под.ред. О.И. Койфмана. - М: КРАСАНД-2012.-480 с.
2. J.Yuen-Zhou, S.K.Saikin, et al., Nature Mater. 13, 1026 (2014).
3. V.S. Lebedev, A.S.Medvedev, Quantum Electronics 43, 1065 (2013).
4. W.Huang, Zh.Ou, et al., J. Porphyrins Phthalocyanines 19, 794 (2015).
5. T. Kroll, R. Kraus, et al., The Journal of Chemical Physics 137, 054306 (2012).
6. H. Fidder, J. Knoester, et al., J. Chem.Phys. 95, 7880 (1991).

Электрон-фононное взаимодействие и высокоэнергетическая часть спектра ARPES купратов с различным допированием

Э. А. Жилеева, Д. В. Мосейкин, А.Э. Мясникова

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Механизм спаривания носителей заряда в купратах, демонстрирующих высокотемпературную сверхпроводимость, остается предметом жарких дискуссий. Один из наиболее информативных методов экспериментального изучения электронной структуры купратов – фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES). Однако интерпретация особенностей спектров ARPES также горячо обсуждается. Купраты представляют собой систему, где имеют место как сильные электронные корреляции, так и сильное электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ), преимущественно дальнедействующее. Сильное ЭФВ проявляется широкими полосами в высокоэнергетической части спектра ARPES. Рассчитать их при одновременном учете обоих взаимодействий удавалось ранее численно для случая короткодействующего ЭФВ [1]. Для случая дальнедействующего ЭФВ такие полосы были рассчитаны аналитически [2] без учета электронных корреляций. Однако при высоких концентрациях носителей заряда предсказания двух упомянутых моделей различны из-за сосуществования локализованных и делокализованных носителей в случае дальнедействующего ЭФВ [3], отсутствующего в случае короткодействующего ЭФВ.

В настоящем исследовании мы развиваем метод [2] с целью учесть электронные корреляции и применить его к системам с любой концентрацией носителей заряда любого знака. Для описания недопированных и допированных дырками, а также сильно допированных электронами купратов используется функция распределения носителей заряда в системе со спонтанно нарушенной трансляционной симметрией [3]. Расчет по развиваемому методу дает высокоэнергетическую часть спектра ARPES, которая количественно и качественно согласуется с экспериментом при любом уровне допирования, как электронами, так и дырками, включая как наличие «водопадов», так и величину «провала» дисперсии, различную при разном допировании.

1. A.S. Mishchenko, N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. 93, 036402 (2004).
2. A.E. Myasnikova, E.N. Myasnikov, Phys. Rev. B 77, 165136 (2008).
3. A.E. Myasnikova et al., Phys. Lett. A 379, 458 (2015).

Третья эйнштейновская относительность

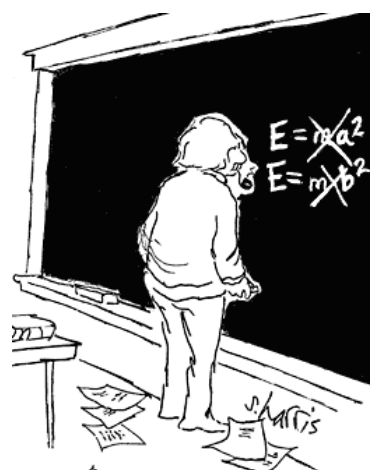
И. Л. Жогин

НПП «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

Специальная и общая теории относительности по-разному описывают пространство-время, но обе используются в физике, в разных ее разделах. Ровелли назвал ситуацию «шизофренической». Здоровая часть физиков, занятых частицами, ставят на СТО (сочетается с квантами), а ОТО – лишь случайное приближение. (Красоту геометрии ОТО заменяют «радушной гравитацией»).

Эйнштейн искал теорию, идущую дальше ОТО (и СТО), со свойствами:

1. Геометрически трактует все взаимодействия (как и гравитацию), и кванты.
2. Нет произвольных параметров («был ли у Бога выбор?»); «константы» это глобальные, «медленные» параметры решения, не теории.
3. Её решения вечны, не обрываются из-за сингулярностей. Добавим, и не могут быть «скучными» – тривиальное решение (линейно) неустойчиво.



Одна из таких попыток связана с уравнениями поля реперов, h^a_{μ} ; симметрия уравнений объединяет симметрии СТО (группа Лоренца, по латинским индексам) и ОТО (группа диффеоморфизмов, греческие индексы)*.

С этой теорией связана фраза Паули: «Неистошима изобретательность г-на Эйнштейна ...». Паули также задал вопросы по делу – о тензоре энергии-импульса и постньютоновских поправках. Эйнштейн тоже не смог ответить на эти вопросы, и писал в письме: «Вы оказались правы, негодник!».

Оказывается, среди совместных уравнений (систем второго порядка) этой теории (а они, как и вакуумное уравнение ОТО, нелинейны) все же обнаруживается [1] исключительный случай (с размерностью $D = 5$, нелагранжев), соответствующий требованиям 2-3, и, возможно, 1.

Нужно рассматривать продолженные уравнения, четвертого порядка (которые также можно получить из вариационного принципа, с квадратичным по уравнению лагранжианом), чтобы прийти к тензору энергии-импульса и гравитации 4-го порядка [1].

1. I.L. Zhogin // Proc. of PIRT-2011. М.: 2012. 337; arXiv: 1109.1679. www.fqxi.org/community/forum/topic/2459

*То есть теория наследует ряд свойств СТО и ОТО, однако (из духа противоречия, и по другим причинам) названа она была совсем иначе – абсолютный параллелизм.

Критическое число солитонов Бозе – Эйнштейновской конденсации

М. Р. Жумаев, М. З. Шарипов, Н. Н. Миржонов

Бухарский инженерно-технологический институт, Бухара, Узбекистан

В последнее время вызывает большой интерес исследование Бозе – Эйнштейновской конденсации (БЭК) и волн материи в сверхнизких температурах. Однако это явление может быть существенным и в формировании высоко – температурной сверхпроводимости. Это связано с тем, что по существу сверхпроводимость есть бозе – конденсация куперовских пар.

В настоящей работе найдено обобщенное уравнение движения солитонов БЭК подчиняющиеся уравнению Гросса – Питаевского, на основе усредненного Лагранжиана и принципа наименьшего действия. Это позволяло получать систему связанных нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, которые описывают изменения амплитуды, ширины, локальной частоты и фазы волновой функции (ВФ) солитонов БЭК. Далее показано, что все параметры ВФ солитонов БЭК можно выражать, зная закон изменения ее ширины. Установлено, что существует критическое число солитонов, равное их наименьшему числу. Показано также периодические изменения средней энергии под действием флуктационных взаимодействий атомов, формирующих БЭК.

Шестипетлевые псевдо- ϵ -разложения и критическая анизотропия нелинейной восприимчивости кубического ферромагнетика

А. Я. Кудлис, А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Критические флуктуации параметра порядка могут менять эффективную анизотропию кубического ферромагнетика вблизи точки Кюри. Если кристалл испытывает фазовый переход в орторомбическую фазу и его исходная анизотропия не слишком велика, эффективная анизотропия приобретает в T_c универсальное значение $A^* = v^*/u^*$, где u^* и v^* – координаты кубической фиксированной точки уравнений ренормгруппы (РГ), входящие в выражения для нелинейных восприимчивостей. В работе с помощью техники псевдо- ϵ -разложения находится значение параметра анизотропии A в критической точке. За основу взяты РГ ряды для β -функций трехмерной кубической модели [1, 2]. Путем итерации системы уравнений для координат особых точек получены псевдо- ϵ -разложения u^* и v^* , а также аналогичный ряд для A^* . Суммирование по Паде шестипетлевых псевдо- ϵ -разложений u^* и v^* и A^* ведет соответственно к оценкам $A^* = 0.1375$ и $A^* = 0.1304$, близким друг к другу. Это подтверждает вывод о том, что техника псевдо- ϵ -разложения превращает расходящиеся РГ ряды в разложения, удобные для практических применений [3–6]. В то же время полученные оценки существенно отличаются от значения $A^* = 0.089$, вытекающего из анализа шестипетлевых разложений самих β -функций [2, 7]. Основными причинами этого расхождения являются, по-видимому, неблагоприятная структура рядов для v^* и A^* и численная малость этих параметров, отражающая близость граничной размерности параметра порядка n_c к физическому значению 3.

1. D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B 61, 15130 (2000).
2. J. M. Carmona, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B 61, 15136 (2000).
3. A. I. Sokolov and M. A. Nikitina, Phys. Rev. E 89, 052127 (2014).
4. A. I. Sokolov and M. A. Nikitina, Phys. Rev. E 90, 012102 (2014).
5. A. I. Sokolov, M. A. Nikitina, Physica A 444, 177 (2016).
6. М. А. Никитина, А. И. Соколов, ТМФ 186, №2 (2016).
7. D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B 64, 094407 (2001).

Оптическое поглощение фуллеренов C_{60} и C_{70} в рамках концепции сильно коррелированного состояния

Б. В. Лобанов, А. И. Мурзашев, Е. М. Жукова

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Как известно, фуллерены образованы атомами углерода, находящимися в состоянии sp^2 -гибридизации [1]. Три гибридных орбитали, формирующие σ -связи, образуют заполненные глубоколежащие электронные состояния. Состояния электронов негибридной орбитали, которая образует так называемые блуждающие π -связи, лежат вблизи уровня Ферми. Следовательно, именно π -электроны дают основной вклад в оптические свойства фуллеренов. Знание энергетического спектра π -электронной системы позволяет объяснить такие свойства; например, зная правила отбора, нетрудно получить спектр оптического поглощения.

При изучении π -электронной системы фуллеренов существенен тот факт, что два электрона, оказавшись на одном узле, испытывают сильное кулоновское взаимодействие, величина которого может достигать значения порядка 10 эВ [2, 3]. Для последовательного учета данного обстоятельства требуется применение модели Шубина-Вонсовского-Хаббарда [4, 5]. Данная модель нами применяется в рамках приближения статических флуктуаций [6]. В ряде работ [7–12], посвященных изучению различных фуллеренов и эндодральных комплексов на их основе с помощью указанного подхода, полученные результаты по оптическому поглощению качественно согласуются с экспериментальными данными.

В настоящей работе были уточнены результаты, полученные ранее для основных фуллеренов C_{60} и C_{70} в работах [7, 8]. Для каждого фуллерена рассчитан энергетический спектр с учетом различия длин связей между неэквивалентными узлами. На основе полученных энергетических спектров смоделированы спектры оптического поглощения; при их построении были учтены также запрещенные оптические переходы, которые становятся возможными вследствие температурных искажений симметрии. В рамках применяемого приближения получено удовлетворительное качественное согласие с экспериментальными спектрами оптического поглощения, измеренными в видимом и ультрафиолетовом диапазонах.

1. Л.Н. Сидоров и др. Фуллерены. Учебное пособие. М.: Экзамен. (2005). 668 с.
2. А.А. Левин. Введение в квантовую химию твердого тела. М.: Химия. (1974). 238 с.
3. T.O. Wehling et al. Phys. Rev. Lett. 106, 236805 (2011).
4. S.P. Shubin, S.V. Wonsowskii. Proc. Roy. Soc. A. 145, 159 (1934).
5. J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A. 276, 238 (1963).
6. В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин. ФНТ. 22, 282 (1996).
7. Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. ФТТ. 53, 2273 (2011).
8. А.И. Мурзашев. Изв. вузов. Физика. 55, 49 (2012).
9. Б.В. Лобанов, А.И. Мурзашев. ФТТ. 55, 797 (2013).
10. И.Е. Кареев, и др. ФТТ. 57, 2254 (2015).
11. А.И. Мурзашев, Т.Э. Назарова. ФММ. 115, 675 (2014).
12. А.И. Мурзашев, Т.Э. Назарова. ЖЭТФ. 146, 1026 (2014).

Дисперсия поверхностных магнитостатических волн в среде с затуханием

П. А. Макаров¹, В. И. Щеглов²

¹ *Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия*

² *Институт радиотехники и электроники РАН, Москва, Россия*

Магнитостатические волны (МСВ), распространяющиеся в ферритовых плёнках – это базовая основа для создания устройств аналоговой обработки данных в СВЧ диапазоне [1]. Минимизация потерь является ключевым вопросом, однако затухание МСВ изучено недостаточно, так как большинство работ выполнены без учета ослабления [2]. Вместе с тем затухание сигнала может существенно изменять закон дисперсии.

В данной работе, на основе решения уравнения Ландау-Лифшица с диссипативным членом в форме Гильберта с учетом граничных условий были получены дисперсионные соотношения для поверхностных МСВ. Геометрия задачи выбрана аналогично нашей предыдущей работе [3], но существенным отличием в данном случае было исследование волн, распространяющихся в плоскости феррита под произвольными углами относительно направления внешнего магнитного поля.

Таким образом, на основе полученных дисперсионных соотношений для действительной и мнимой частей волнового числа при учете затухания и направления распространения волны показано, что имеет место ограничение дисперсионных кривых по волновому числу и по частоте. Выявлено, что с увеличением параметра затухания эти ограничения усиливаются. Кроме того, установлено, что затухание ответственно за появление новой ветви обратных диссипативных волн и показано, что для обратных волн имеется критическое значение параметра затухания, выше которого эти волны отсутствуют. Также установлено, что при увеличении угла между направлением распространения ПМСВ и нормалью к полю происходит ограничение дисперсии, причем ветви дисперсионных кривых смещаются в сторону меньших волновых чисел. Кроме того, параметр затухания приобретает ограничение не только сверху, но и снизу.

1. Ishak W.S. Proceedings of the IEEE. 76 (2), 171-187, (1988).

2. Damon R.W., Eshbach J.R. J. Phys. Chem. Solids. 19 (3/4), 308-320, (1961).

3. Макаров П.А., Шавров В.Г., Щеглов В.И. Журнал радиоэлектроники, 7, (2014).

Магнитные свойства ультратонких пленок манганита CaMnO_3 на подложке BaTiO_3

Е. К. Михайленко¹, С. М. Дунаевский^{1, 2}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

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

Манганиты представляют собой соединения со структурой перовскита, магнитные свойства которых меняются в зависимости от уровня легирования. Наибольший интерес в настоящее время вызывают исследования ультратонких плёнок этих материалов [1–3], а также гетеропереходов на их основе. Благодаря наличию поверхностей раздела, физические свойства пленок отличаются от объемных свойств кристаллов, что необходимо учитывать при создании различных элементов спинтроники. В настоящей работе методом теории функционала плотности в приближениях LDA и LDA+U исследуются магнитные свойства ультратонких слоёв типа (100) нелегированных манганитов кальция CaMnO_3 , расположенных на подложке BaTiO_3 (структура перовскита). В работе представлены результаты *ab-initio* расчётов, выполненных в рамках метода псевдопотенциала, реализуемого программным комплексом Quantum Espresso. Вычисления выполнялись для суперячеек, моделирующих объём, свободные поверхности и поверхности раздела (001) структур $\text{Ca}_n\text{Mn}_{n+1}\text{O}_{3n+1}/\text{Ba}_m\text{Ti}_{m+1}\text{O}_{3m+1}$, где $n=1-3$, $m=1-7$, разделённых вакуумным промежутком $\sim 1,5$ нм. Вычислены полные энергии возможных состояний, соответствующих случаям ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочения (типа А) в объёме и у поверхности раздела гетероструктур. Структурная оптимизация геометрии ячейки проводилась методом сопряжённого градиента. Результаты расчётов позволяют сделать вывод об отсутствии «мёртвых слоёв» (“dead layers”) [4] на поверхности манганитов, а также определить энергетически выгодные антиферромагнитные упорядочения (А-типа). Наиболее интересным результатом расчетов является обнаружение в таких гетероструктурах полностью поляризованной плотности состояний вблизи уровня Ферми.

1. J. Stahn et al., Phys. Rev. B 71, 140509(R) (2005).

2. Hoffmann et al., Phys. Rev. B 72, 140407(R) (2005).

3. J. Chakhalian et al., Nature Phys. 2, 244 (2006).

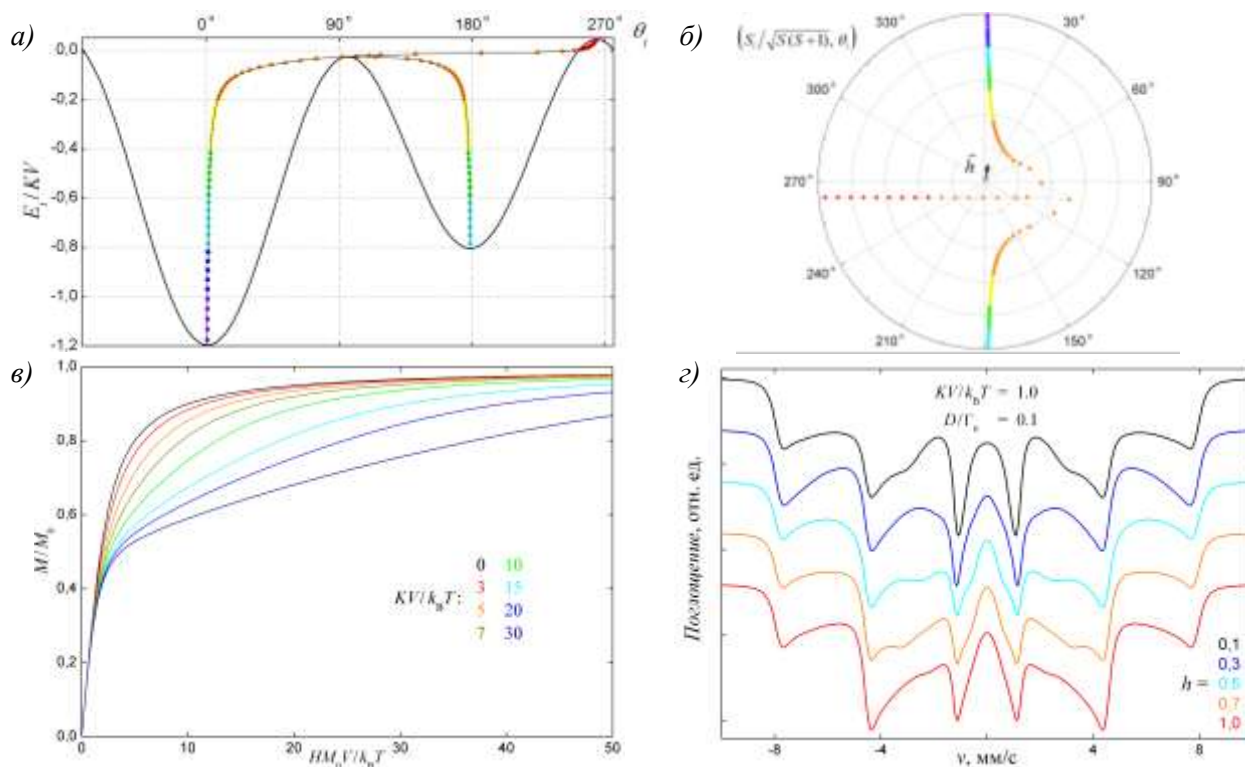
4. M. J. Calderón, L. Brey, and F. Guinea, Phys. Rev. B 60, 6698(1999).

Квантовая модель магнитной динамики однодоменных частиц для описания кривых намагничивания и мёссбауэровских спектров магнитных наноматериалов в слабом магнитном поле

И. Н. Мищенко, М. А. Чуев

Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

На основании квантово-механического рассмотрения частицы с полным спином S и собственной энергией магнитной анизотропии с плотностью K [1], находящейся во внешнем поле с относительной напряжённостью $h = H / H_c$ (H_c – поле полного перемагничивания) [2], разработан единый подход к описанию равновесных кривых намагничивания и релаксационных мёссбауэровских спектров магнитных наночастиц для согласованного анализа данных магнитометрических и гамма-резонансных экспериментов.



а) Макроскопический энергетический профиль ферромагнитной частицы во внешнем магнитном поле с относительной напряжённостью $h = 0,1$ и углом отворота от лёгкой оси $\Theta_h = 10^\circ$ совместно с набором квантово-механических энергетических уровней частицы при $S = 50$. б) Соответствующие стационарные состояния частицы в плоскости лёгкой оси и внешнего поля. в) Равновесные кривые намагничивания ансамбля наночастиц в зависимости от энергии их магнитной анизотропии. г) Релаксационные мёссбауэровские спектры поглощения ансамбля частиц во внешнем поле разной напряжённости

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 14-15-01096.

1. D. H. Jones, K. K. P. Srivastava. Phys. Rev. B. 34 (1986).
 2. М.А. Чуев. ЖЭТФ. 141, 4 (2012).

Ab initio исследование обменного взаимодействия в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, $\text{Y}_2\text{V}_2\text{O}_7$

Д. В. Назипов, А. Е. Никифоров, В. А. Чернышев

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Магнитные оксиды со структурой пирохлора $\text{R}_2\text{M}_2\text{O}_7$ (R – редкоземельный ион или Y, M – ион переходного металла) являются объектами повышенного внимания среди исследователей, благодаря своим необычным магнитным свойствам [1]. Соединения на основе ванадия $\text{Lu}(\text{Y})_2\text{V}_2\text{O}_7$ в последнее время обратили на себя внимание в связи с обнаружением эффекта Холла на магнонах [2]. Представляет особый интерес анализ микроскопических механизмов ферромагнитного упорядочения ионов V^{4+} на пирохлоровой решетке и значительного по величине антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мория.

В данной работе проведен первопринципный расчет электронной структуры и параметров обменного взаимодействия в кристаллах $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ и $\text{Y}_2\text{V}_2\text{O}_7$ методом неограниченного Хартри-Фока и в рамках теории функционала плотности (DFT) используя гибридные функционалы. Расчеты проведены в программном пакете CRYSTAL14 [3].

В рамках исследования рассчитаны значения обменного интеграла при разных долях Хартри-Фоковской энергии в обменно-корреляционном функционале. Наилучшее согласие с экспериментом достигнуто при доле Хартри-Фока 100 %, полученные значения равны 8,18 мэВ и 7,67 мэВ для $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ и $\text{Y}_2\text{V}_2\text{O}_7$ соответственно. Из первых принципов мы подтвердили, что в данных соединениях коллинеарная ферромагнитная структура энергетически более выгодна, чем антиферромагнитные структуры. Кроме того, получено расщепление $3d^1$ уровня атома V^{4+} в кристаллическом поле, используя модельный подход в приближении точечных зарядов, в том числе с учетом спин-орбитального взаимодействия.

1. J. S. Garden et al. Magnetic pyrochlore oxides. Rev. Mod. Phys. 82, 53-107 (2010).
2. Y. Onose et al. Observation of magnon Hall effect. Science 329, 5989, 297-299 (2010).
3. URL: <http://www.crystal.unito.it/>

Расчет из первых принципов атомной структуры $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$

Нгуен Тхи Тхам Хонг, Хоанг Вьет Хунг

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Энергия формирования атомной структуры была рассчитана «из первых принципов» в рамках теории функционала электронной плотности и PAW-потенциалов, как это реализовано в программном пакете ABINIT. Обменно-корреляционный функционал описывался в рамках обобщенного градиентного приближении (GGA). Обрезание базиса плоских волн кинетической энергией 900 эВ и сетка k-точек в зоне Бриллюэна $7 \times 7 \times 3$ обеспечили точность расчета полной энергии 1 мэВ/атом. Релаксация параметров решетки и положений атомов к минимуму конфигурационной энергии с использованием алгоритма [1] проводилась до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, были больше 2.5 мэВ/Å.

Известно, что четверное соединение $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ принадлежит к семейству I-II-IV-VI полупроводников с двумя кристаллографическими модификациями кестерит и станнит. В данной работе расчеты полной энергии проводились для 16 атомов, лежащих внутри одной элементарной ячейки со структурой кестерита и станнита. Исходные параметры элементарной ячейки и координаты атомов, необходимые для расчетов взяты из [2].

Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом. Параметры решеток составили $a=5.475 \text{ \AA}$, $c=10.93 \text{ \AA}$ для кестерита и $a=5.463 \text{ \AA}$, $c=10.957 \text{ \AA}$ для станнита. В эксперименте $a=5.426 \text{ \AA}$, $c=10.810 \text{ \AA}$ и $a=5.432 \text{ \AA}$, $c=10.903 \text{ \AA}$ для структур кестерита и станнита, соответственно [3]. Видно, что отклонение параметров решетки от эксперимента не превышает 1.1 %.

Полученный расчет показал, что наиболее стабильной является структура типа кестерит, однако разность значений полной энергии для структур кестерита и станнита незначительна $\Delta E=2.722 \text{ мэВ/атом}$.

1. H.V. Schlegel, J. Comput. Chem. 3, 214 (1982).
2. Alain Lafond, Léo Choubrac, J. Ino. Gen. Che. 638, 2571 (2012).
3. H. Katagiri, N. Sasaguchi, Energy Mater. Sol. Cells 49, 407 (1997).

Псевдо- ϵ -разложение и критические индексы трехмерных систем

М. А. Никитина^{1, 2}, А. И. Соколов¹

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

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия

Представлены псевдо- ϵ -разложения критических индексов трехмерной изотропной n -векторной модели (обобщенной модели Гейзенберга). Они найдены на основе шестипетлевых ренормгрупповых разложений. Конкретные численные результаты приведены для физически интересных случаев $n = 1, 2, 3$ и $n = 0$, а также для $n > 3$ с тем, чтобы выявить общие свойства полученных рядов. Псевдо- ϵ -разложения критических индексов восприимчивости и теплоемкости имеют малые и быстро убывающие по модулю коэффициенты, так что вполне приемлемые численные оценки дает уже прямое суммирование этих рядов. Обработка же полученных псевдо- ϵ -разложений с помощью аппроксимант Паде позволяет прийти к высокоточным результатам [1]. Напротив, коэффициенты псевдо- ϵ -разложения индекса поправки к скейлингу ω не имеют выраженной тенденции к убыванию при физических значениях n . Однако соответствующие ряды знакопеременны, и для получения надежных численных оценок здесь также оказывается достаточным использование простых аппроксимант Паде. Высокое качество численных результатов, даваемых техникой псевдо- ϵ -разложения, подтверждается как сравнением найденных чисел с прецизионными ренормгрупповыми и решеточными оценками, так и уровнем точности, с которой для них выполняются соотношения скейлинга. Это может служить еще одним аргументом в пользу вывода о том, что техника псевдо- ϵ -разложения представляет собой специфический метод пересуммирования, превращающий расходящиеся ренормгрупповые ряды в разложения, очень удобные с вычислительной точки зрения [2–5].

1. М. А. Никитина, А. И. Соколов, ТМФ, 186, №2 (2016).
2. М. А. Nikitina and A. I. Sokolov, Phys. Rev. E 89, 042146 (2014).
3. A. I. Sokolov and M. A. Nikitina, Phys. Rev. E 89, 052127 (2014).
4. A. I. Sokolov and M. A. Nikitina, Phys. Rev. E 90, 012102 (2014).
5. A. I. Sokolov, M. A. Nikitina, Physica A 444, 177 (2016).

Контакт спиральных краевых состояний топологических изоляторов: фермионный подход

Р. А. Ниязов^{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*

Интерес к топологическим изоляторам связан с наличием на границах таких материалов топологически защищенных краевых состояний, которые являются идеальными одномерными квантовыми нитями.

В частности, представляет собой интерес поведение стыков таких нитей и перенормировка кондактанса (коэффициентов «перескока») взаимодействием. Теоретическое изучение транспортных свойств квантовых проволок началось с 90-х гг. в рамках модели жидкости Латтинжера и в формализме бозонизации. Было показано, что взаимодействие между электронами перенормирует рассеяние на примеси: проводимость нити падает до нуля при отталкивающем взаимодействии в пределе малых температур даже для одной примеси.

В данной работе нас интересует угловой стык одномерных спиральных краевых состояний топологических изоляторов. В работе [1] было показано, что ренормгрупповые уравнения кондактанса содержат 7 стационарных точек (СТ). Три из них стабильные. Анализ обобщенного случая при разных константах взаимодействия ТИ показывает, наличие двух фаз [2]. Первая – когда те же 3 СТ притягиваются, вторая – когда остаётся только 1 СТ. Оказывается, моделью такого контакта также описывается случай туннелирования электронов в спиральное краевое состояние из кончика нити с неполяризованными электронами. В этом случае мы всегда имеем только одну СТ, но появляются две стационарные линии, поведение которых зависит от констант взаимодействия. Этот случай представляет интерес с точки зрения туннельной микроскопии новых материалов.

1. J. C. Y. Teo, C. L. Kane, Phys. Rev. B 79, 235321 (2009).

2. D.N. Aristov, R.A. Niyazov, submitted to Phys. Rev. B.

Управляемое воздействие на электронные состояния квантовой точки с помощью графена

А. К. Нухов^{1, 2}, Г. М. Мусаев¹, А. М. Агаларов²

¹ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

² Институт физики им. И. М. Амирханова ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

Исследованы электронные состояния системы «квантовая точка – монослой графена – подложка $SiO_2 + n^+ Si$ ». Получено аналитическое выражение для величины переходящего заряда в такой системе. Исследуемая система позволяет управлять оптическими свойствами квантовой точки с помощью приложенного электрического поля.

Рассмотрим систему, состоящую из эпитаксиального графена и сформированной на нем квантовой точки (рис. 1). Рассмотрение проводится в рамках модели Андерсона-Ньюнса [1–5].

Как легко показать, плотность состояний графена вблизи точки Дирака имеет вид

$$\rho_g(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi v_F^2 \hbar^2}, \quad (1)$$

где ε – энергетическая переменная, v_F – скорость Ферми, которая для электронов графена имеет значение порядка 10^8 см/с, индекс g означает “*graphene*”. В модели Андерсона-Ньюнса для спектральной функции квантовой точки получаем

$$A(\varepsilon) = \frac{\Gamma + \pi |V|^2 \rho_g(\varepsilon)}{(\varepsilon - E_n)^2 + (\Gamma + \pi |V|^2 \rho_g(\varepsilon))^2}, \quad (2)$$

где E_n – энергетический спектр электронов квантовой точки, V – потенциал гибридизации Γ – затухание одночастичных возбуждений в квантовой точке за счет внутренних столкновительных процессов. Для плотности состояний квантовой точки, соответственно, получим

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{n_F} \frac{\Gamma + \alpha \Omega}{(\varepsilon_0 \Omega - E_n)^2 + (\Gamma + \alpha \Omega)^2}, \quad (3)$$

где $\alpha = |V|^2 \varepsilon_0 / v_F^2 \hbar^2$, $\Omega = \varepsilon / \varepsilon_0$ – безразмерная энергия, ε_0 – некоторая характеристическая энергия, n_F – число состояний под уровнем Ферми. Квантовую точку можно представить в виде трехмерной прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Тогда для энергетического спектра электронов квантовой точки имеем $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} = E_1 n^2$,

где L – линейный размер квантовой точки. Интегрируя (3) от нуля до $\Delta\Omega_F = (E_F - \varepsilon_F)/\varepsilon_0$ можно получить выражение для переходящего заряда

$$\langle n \rangle_{\pm} = \pm \frac{\alpha}{(1+\alpha^2)^2} \sum_{n=1}^{n_F} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(\varepsilon_0 \Delta\Omega_F - E_n)^2 + \Lambda}{E_n^2 + \Lambda} \right] + \frac{E_n}{\sqrt{\Lambda}} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_0 \Delta\Omega_F - E_n}{\sqrt{\Lambda}} \right) + \operatorname{arctg} \left(\frac{E_n}{\sqrt{\Lambda}} \right) \right] \right\}, \quad (4)$$

где знак плюс соответствует переходу заряда из графена в квантовую точку ($\varepsilon_F > E_F$), а минус – переходу заряда из квантовой точки в графен ($\varepsilon_F < E_F$), $\Lambda = E_n^2 \left(1 - 1/(1+\alpha^2)^2 \right)$, ε_F – энергия Ферми электронов графена, $E_F = E_{n_F}$ – энергия Ферми электронов квантовой точки. Энергия Ферми электронов графена отлична от нуля благодаря приложенному напряжению (см. рис. 1). Более того, с помощью последнего можно легко управлять энергией Ферми. Прикладывая напряжение с различной полярностью можно допировать графен как электронами, так и дырками. Тем самым можно легко управлять количеством и типом носителей в графене, а, следовательно, и величиной переходящего заряда. Уровень Ферми зависит от приложенного напряжения V следующим образом

$$\varepsilon_F = v_F \hbar \sqrt{\frac{\xi V}{ed}} \quad (5)$$

где d – толщина подложки, e – заряд электрона, ξ – диэлектрическая проницаемость подложки. Учитывая в выражении (4) зависимость (5) можно легко определить величину переходящего заряда как функцию от приложенного напряжения (рис. 2).

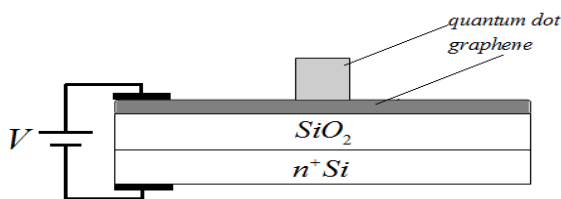


Рис. 1

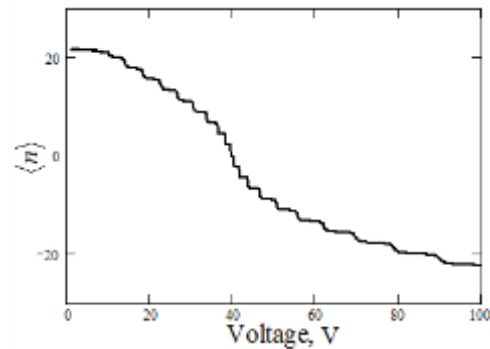


Рис. 2

1. Anderson P.W. // Phys. Rev. 1961. V. 124. N. 1. P. 41-53.
2. Newns D.M. // Phys. Rev. 1969. V. 178. N. 3. P. 1123.
3. Давыдов С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. Вып. 10. С. 64-67.
4. Давыдов С.Ю. // ФТП. 2011. Т. 45. Вып. 6. С. 629-633.
5. Давыдов С.Ю. // ФТП. 2011. Т. 45. Вып. 8. С. 1102-1108.

Структурные, колебательные и упругие свойства редкоземельных ферроборатов $RFe_3(BO_3)_4$: первопринципный расчет

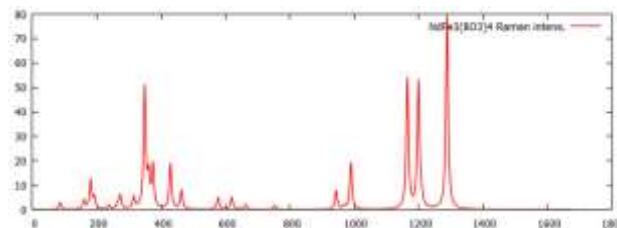
В. П. Петров, В. А. Чернышев, А. Е. Никифоров

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Материалы, используемые в лазерной технике, представляют собой сложные соединения с ионно-ковалентной химической связью, содержащие подрешетку либо примесные центры редкоземельных (РЗ) ионов. Первопринципные расчеты являются наиболее последовательным подходом для анализа связи «структура – химический состав – свойства» в этих соединениях. Ферробораты $RFe_3(BO_3)_4$ ($R = Pr, Nd, Sm$) интенсивно исследуются благодаря проявлению магнитных и магнитоэлектрических свойств [1–3]. Исследование механизмов взаимодействия электрической и магнитной подсистем в ферроборатах [4] приводит к необходимости изучения их фононных спектров [5].

В связи с этим представляется актуальным провести первопринципный расчет решеточных колебаний. В данной работе предлагается систематическое исследование структуры и динамики сложных соединений с подрешеткой РЗ ионов с использованием псевдопотенциалов для описания внутренних оболочек редкоземельного иона. В работе последовательно была рассчитана кристаллическая структура (в пространственной группе $R\bar{3}2$), затем фононный спектр с учетом ЛО-ТО расщепления. Степень участия иона в той или иной колебательной моде оценена путем расчета с изотопическим замещением, а также из анализа векторов смещений. Расчеты проводятся в программном пакете CRYSTAL14 [6] в рамках теории функционала плотности с применением гибридных функционалов (B3LYP, PBE0).

Результаты расчета хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.



Спектр комбинационного рассеяния $NdFe_3(BO_3)_4$

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/К) и Правительства РФ (контракт №02.А03.21.0006, постановление №211). Для расчетов использовался вычислительный кластер ИММ УрО РАН.

1. Кадомцева А.М., Попов Ю.В., Воробьев Г.П., Мухин А.А., Иванов В.Ю., Кузьменко А.М., Безматерных Л.Н. Письма в ЖЭТФ. 87, 45 (2008).
2. Звягина Г.А., Жеков К.Р., Звягин А.А., Билич И.В., Безматерных Л.Н., Гудим И.А. ФНТ. 36, 4, 376 (2010).
3. Костюченко Н.В., Попов А.И., Звездин А.К. ФТТ 54, 1493 (2012).
4. Песчанский А.В., Еременко А.В., Фомин В.И., Безматерных Л.Н., Гудим И.А. ФНТ. 40, 2, 219 (2014).
5. Boldyrev K.N., Stanislavchuk T.N., Sirenko A.A., Bezmaternykh L.N., Popova M.N. Phys. Rev. B. 90, 121101 (2014).
6. Dovesi R., Orlando R., Erba A., Zicovich-Wilson C.M., Civalleri B., Casassa S., Maschio L., Ferrabone M., De La Pierre M., D'Arco P., Noel Y., Causa M., Rerat M., Kirtman B. Int. J. Quantum Chem. 114, 1287 (2014).

Глубокая примесь в углеродных нанотрубках и туннельный ток

А. А. Полунина¹, Н. Н. Конобеева, М. Б. Белоненко^{1,2}

¹ *Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

² *Волгоградский институт бизнеса, Волгоград, Россия*

В данной работе исследуется туннельный ток, протекающий в контакте углеродных нанотрубок (УНТ) с глубокими примесями и металла. Глубокой примесью принято называть примесь, создающую глубокий энергетический уровень. Стоит отметить, что все более популярным становится направление исследований, связанное с изучением подобных примесей, а также их влияния на электронную структуру и, следовательно, на свойства полупроводников. Такой вниманием к данному вопросу обусловлено в первую очередь тенденциями современной опто-, микро- и СВЧ-электронике, а, именно, ужесточением требований к качеству полупроводникового материала, содержанию примесей с глубокими уровнями в запрещенной зоне. Наличие таких примесей может вызывать как положительные, так и отрицательные эффекты. Следовательно, для минимизации нежелательного влияния важно изучать природу глубоких примесей, чтобы наиболее эффективно использовать положительное влияние на функциональные характеристики приборов.

В тоже время внимание исследователей привлекает задача о туннелировании, так как устройства, основанные на туннельном эффекте прочно вошли в элементную базу современной электроники и имеют большое практическое применение (туннельные диоды).

Гамильтониан системы был переписан с использованием структуры блочных матриц. В длинноволновом приближении можно записать эффективный гамильтониан задачи:

$$H_{eff} = H_{11} - H_{12}H_{22}^{-1}H_{21}.$$

Далее решаем задачу на собственные значения. Плотность тока контакта задавалась в рамках теории Кубо. В результате было изучено влияние примеси на туннельные характеристики контакта УНТ с металлом, выявлено влияние ширины запрещенной щели глубокой примеси, а также перехода между уровнями примеси на зависимость туннельного тока от напряжения между контактами.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 16-32-00230).

Соотношения Крамерса – Кронига для оптической активности голубых фаз жидких кристаллов

А. И. Пруткин

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия
Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия*

Голубые фазы наблюдаются в некоторых холестерических жидких кристаллах как промежуточные состояния между изотропной жидкостью и холестерической фазой с интервалом температуры порядка градуса. В отличие от одномерной спиральной структуры холестерической фазы, голубые фазы обладают трёхмерной спиральной структурой с кубической симметрией, похожей на структуру скирмионных фаз в магнетиках. Эти состояния характеризуется наличием таких особенностей, как оптическая изотропия, значительная оптическая активность и селективное рассеяние в области видимого света, обладающее сложными поляризационными характеристиками.

Для экспериментального исследования голубой фазы оказывается информативной методика измерения кругового дихроизма, который зависит от различия коэффициентов пропускания лево- и право-поляризованного света. Целью работы является исследование дисперсионных соотношений Крамерса – Кронига для вращения плоскости поляризации и кругового дихроизма. Из представленных расчётов следует, что для голубых фаз (как и в случае метаматериалов [1]) эти соотношения выполняются лишь при добавлении в них так называемого множителя Бляшке. Расчёты проведены на основе динамической теории дифракции с использованием простых топологических соображений [2].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-12-00416).

1. M. V. Gorkunov, V. E. Dmitrienko, A. A. Ezhov, V.V. Artemov, O. Y. Rogov, Causality relations for materials with strong artificial optical chirality, Scientific Reports vol. **5**, 9273 (2015).
2. V. E. Dmitrienko, Diffraction in crystals and topology, J. Phys. I France vol. **1**, 1187 (1991).

Описание тепловых волн в коже человека с использованием модели температурной динамики Шитцера: взаимосвязь температура-кровотоков

А. А. Сагайдачный, А. В. Скрипаль, Д. А. Усанов, И. Ю. Волков, А. В. Фомин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Определение ритмов колебаний кожного кровотока, порождающих колебания температуры кожи является важной биофизической задачей, например, при изучении процессов лечения ожогов. Представление о том, что колебания кровотока порождают тепловые волны, распространяющиеся из глубины к поверхности кожи [1], дает возможность использовать математические выражения для тепловых волн, устанавливающие связь кровотоков-температура. Как показывают результаты исследований, кожа играет роль фильтра нижних частот для тепловых волн [2]. Другим способом определения кожного кровотока является модель Шитцера [3]. Целью данной работы является установление амплитудно-частотных и фазо-частотных характеристик, описывающих модель Шитцера при осуществлении перехода температура – кровотоков.

В соответствии с моделью Шитцера связь объемного кровотока с температурой кожи устанавливается с помощью уравнения:

$$\rho \cdot C \cdot V \cdot \frac{dT(t)}{dt} = -H_{air} \cdot S \cdot (T(t) - T_{air}) + \rho_b \cdot c_b \cdot BF(t) \cdot (T_b - T(t)) + Q_m, \quad (1)$$

где S – площадь пальца, V – объем пальца, D – диаметр пальца, t – время, ρ – плотность биоткани, ρ_b – плотность крови, c и c_b – удельные теплоемкости биоткани и крови, T_b – температура крови, T_{air} – температура воздуха, $T(t)$ – температура кожи, BF – объемный кровоток, Q_m – метаболическое тепло, H_{air} – коэффициент конвекции воздуха.

Выразим кровоток BF из уравнения (1):

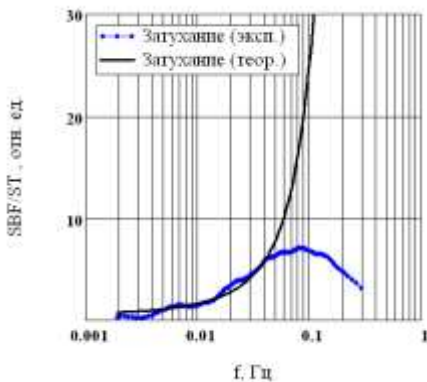
$$BF(t) = \frac{\frac{dT(t)}{dt} + C_1 \cdot (T(t) - T_{air})}{C_2(T_b - T(t))}, \quad (2)$$

где C_1 , C_2 – константы. Таким образом, вычисление прямого преобразования температуры в кровотоков происходит посредством определения производной температуры по времени. Для обратного преобразования кровотока в температуру необходимо решить дифференциальное уравнение первого порядка. Одним из альтернативных способов определения температуры является упрощение выражения (2), учитывающее, что температура – медленно изменяющаяся величина, поэтому $T(t_j) \approx T(t_{j-1})$. Задавая приблизительное начальное значение $T(t_0) = T_0$ температуру можно выразить через кровотоков с помощью ряда:

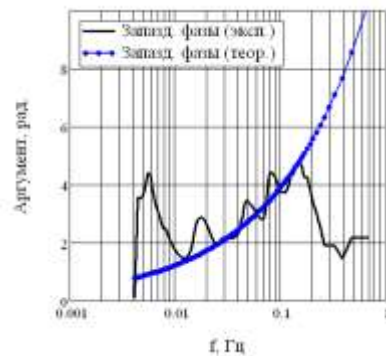
$$T(t_j) = \sum_{k=0}^j [C_2 \cdot BF(t_k) \cdot (T_b - T(t_{j-1})) - C_1(T(t_{j-1}) - T_{air})] \quad (3)$$

Таким образом, выражения 2 и 3 составляют пару прямого и обратного преобразований температуры в кровотоки.

Определим влияние преобразования (2) на спектр входного сигнала температуры. Для этого вычислим интегральные вейвлет-спектры входного сигнала температуры и выходного сигнала кровотока. Для определения амплитудных изменений возьмем отношение интегральных спектров кровотока и температуры (рис. а), для определения фазовых изменений сравним аргументы соответствующих вейвлет-коэффициентов (рис. б). Теоретические кривые на рисунке построены с использованием формул для тепловой волны.



а)



б)

Амплитудно-частотная (а) и фазо-частотная (б) характеристики, описывающие преобразование температуры в кровотоки с помощью выражения (2)

Данные на рисунке демонстрируют, что уравнение Шитцера приводит к преобразованию спектра колебаний температуры в спектр колебаний кровотока, таким образом, что амплитудно-частотная характеристика преобразования описывается формулой затухания температурной волны в диапазоне 0,001–0,05 Гц, а фазо-частотная характеристика – формулой дисперсии температурной волны в диапазоне 0,01–0,1 Гц. Это открывает возможность замены решения уравнения (1) спектральными преобразованиями, позволяющими определить сигнал кожного кровотока с использованием температурных данных.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук, проект МК-4204.2015.8 и фонда РФФИ, проект №16-32-00433.

1. Sagaidachnyi A.A., Skripal A.V., Fomin A.V. and Usanov D.A. Determination of the amplitude and phase relationships between oscillations in skin temperature and photoplethysmography – measured blood flow in fingertips // *Physiological measurement*, 2014, vol. 35, № 2. pp. 153-166.
2. Сагайдачный А. А., Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Фомин А. В. Электротепловая аналогия свойств кожи и фильтра низких частот: взаимосвязь колебаний температуры и кожного кровотока в области конечностей // *Математическая биология и биоинформатика*. – 2014. – Т. 9. – №. 2. С. 309-318.
3. Sagaidachnyi A. A. , Usanov D. A., Skripal A. V., and Fomin A. V. Correlation of skin temperature and blood flow oscillations // *Saratov Fall Meeting 2011. – International Society for Optics and Photonics*, 2012. P. 83370A-83370A-8.

Перколяционный сценарий перехода из сверхтекучести в фазу Бозе-стекла

А. В. Сизанов¹, А. В. Сыромятников^{1, 2}

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

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

Мы исследуем квантовый фазовый переход из фазы сверхтекучести в фазу Бозе-стекла на примере простой системы: (анти)ферромагнетика с маленькой анизотропией типа «лёгкая плоскость» в поперечном магнитном поле с бинарным беспорядком в анизотропии. Мы показываем, что квантовая критическая точка может быть описана в терминах исчезновения бесконечного упорядоченного кластера. И критические индексы перехода связаны с перколяционными, что находит подтверждение в существующих экспериментальных и численных работах.

Высокочастотные магнитные свойства многослойных гетерогенных пленок на основе нанокompозитов ферромагнитный металл – диэлектрик

О. С. Тарасова, А. В. Ситников, Ю. Е. Калинин, Х. С. М. Аль Аззави

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Методом ионно-лучевого распыления получены пленки композитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$, $(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$, $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и многослойных гетерогенных структур композит-композит $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}+\text{N}_2]\}_n$, $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$, $\{[(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}]/[(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$ и $\{[(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}]/[(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$ состоящих из чередующихся слоев композита полученного в атмосфере аргона и прослоек осажденных в атмосфере аргона с добавлением активных газов (O_2 или N_2).

Сравнение процессов намагничивания и комплексной магнитной проницаемости композитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ и многослойных структур $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}+\text{N}_2]\}_n$ $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$ после порога перколяции показало, что в последних значительно уменьшилось поле выхода намагниченности пленки в насыщение и увеличились значения μ' и μ'' . Это связано с подавлением перпендикулярной магнитной анизотропии пленок при введении в структуру прослоек из композитов, полученных с добавлением активных газов.

Сравнение процессов намагничивания и комплексной магнитной проницаемости композитов $(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и многослойных структур $\{[(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}]/[(\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$ после порога перколяции показало, что в последних значительно увеличилась степень магнитной анизотропности ($H_{\text{нас}}(\parallel)/H_{\text{нас}}(\perp)$) образцов в плоскости пленки и отношение μ'/μ'' на частоте 50 МГц при $2,4 \cdot 10^{-5} \leq P_{\text{O}_2} \leq 3,2 \cdot 10^{-5}$ Торр. Это связано с уменьшением влияния перпендикулярной текстуры расположения гранул в многослойных пленках.

Сравнение процессов намагничивания и комплексной магнитной проницаемости композитов $(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и многослойных структур $\{[(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}]/[(\text{Co}_{84}\text{Nb}_{14}\text{Ta}_2)_x(\text{SiO}_2)_{100-x}+\text{O}_2]\}_n$ после порога перколяции показало, что в последних полученных при $P_{\text{O}_2} \leq 1,4 \cdot 10^{-4}$ Торр магнитные параметры не претерпели значительных изменений. Структурные изменения в многослойных образцах не оказывают влияние на магнитные свойства.

Зонная структура спектра магнонов на решетке скирмионов

А. В. Цыпильников^{1, 2}, Д. Н. Аристов^{2, 1}

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

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

Различные экзотические спиновые структуры в магнетиках давно привлекают к себе внимание многих исследователей, как с точки зрения теории, так и с точки зрения эксперимента. Один из примеров таких структур – это скирмионная решетка, возможность которой предсказывалась в соединениях структурного типа B20.

Отличительной особенностью скирмионов является нелинейность описывающих их уравнений и статическая стабильность, т. к. такие конфигурации спинов удовлетворяют локальному минимуму энергии обменного взаимодействия

Одно из первых предсказаний существования скирмионов в магнетиках было сделано в работе [1], там же была проанализирована стабильность конфигурации скирмиона на диске в классическом случае. Здесь стоит заметить, что до недавнего времени большинство теоретических работ на эту тему ограничивались лишь классическим рассмотрением динамики скирмионов. Недавно в работе [2] был применен метод квазиклассического квантования и проведен анализ спектра магнонов в такой конфигурации. Однако там анализируется конфигурация с одним скирмионом на плоскости.

В данной работе рассчитывается спектр магнонов на решетке скирмионов. Сначала применяется метод ВКБ для одного скирмиона на диске с оптимальным радиусом, минимизирующим классическую энергию системы, с учетом изотропного гейзенберговского обмена, взаимодействия Дзялошинского – Мория и внешнего магнитного поля. Уравнение Шредингера для магнонов в конфигурации с одним скирмионом удается вывести аналитически, однако спектр и волновые функции магнонов удается получить только численными методами. Затем, используя метод, аналогичный методу сильной связи для электронных спектров в металле, мы находим спектр магнонов на гексагональной решетке скирмионов.

1. Rößler, U. K., Bogdanov, N. & Pfleiderer, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. Nature 442, 797–801 (2006).

2. D. N. Aristov, S. S. Kravchenko, A. O. Sorokin, “Magnon spectrum in ferromagnets with a skyrmion”, Письма в ЖЭТФ, 102, 511 (2015).

Динамика решетки редкоземельных титанатов $R_2Ti_2O_7$ ($R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$): *ab initio* расчет

В. А. Чернышев, В. П. Петров, А. Е. Никифоров

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Проведен *ab initio* расчет кристаллической структуры и фононного спектра титанатов со структурой пирохлора $R_2Ti_2O_7$ ($R = Gd-Lu$). Расчеты были выполнены в приближении МО ЛКАО в программе CRYSTAL09 [1], предназначенной для периодических структур, методом функционала плотности (DFT B3LYP и DFT PBE0).

Определены частоты и типы фундаментальных колебаний. Для $R = Tb, Tm, Yb$ подобный расчет выполнен впервые, причем для Tm и Yb в печати отсутствует информация об экспериментальных исследованиях фононного спектра.

Исследовано влияние гидростатического давления до 35 GPa на структуру, динамику и упругие свойства решетки $Gd_2Ti_2O_7$. Получена зависимость частот фононов от давления. Расчеты предсказывают, что в диапазоне до 35 GPa относительное изменение объема структуры пирохлора при сжатии хорошо описывается уравнением состояния Берча--Мурнагана 3-го порядка. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что можно получить хорошее описание структурных, динамических и упругих свойств кристаллической решетки $R_2Ti_2O_7$, заменив внутренние оболочки РЗ-иона, по 4f включительно, на псевдопотенциал.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/К) и Правительства РФ (контракт №02.А03.21.0006, постановление №211).

1. R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C.M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell. CRYSTAL09 User's Manual. University of Torino, Torino, Italy (2009).

***Ab initio* расчет диэлектрических свойств октаэтилпорфирина кобальта методом присоединенных плоских волн в рамках *GW*-приближения**

Д. С. Чуб¹, О. В. Фарберович^{3, 2, 1}

¹ *Международный исследовательский центр «Интеллектуальные материалы», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

² *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

³ *Школа физики и астрономии, факультет точных наук им. Рэймонда и Беверли Саклер, Тель-Авивский университет, Тель-Авив, Израиль*

Интерес к порфиринам и металлокомплексам на основе порфирина обусловлен уникальной геометрической, электронной и магнитной структурой этих молекул. Нелинейно-оптические свойства и высокая поляризуемость делают металлпорфирины перспективными для применения в качестве активных сред оптической коммуникации [1, 2], хранение информации [3], обработки оптических и электрических сигналов [4]. Также порфирины представляют интерес в качестве низкоразмерных проводников [5, 6], молекулярных магнетиков [7], люминесцентных материалов [8].

Представлены результаты *ab initio* расчетов действительной и комплексной частей диэлектрической проницаемости октаэтилпорфирина кобальта. Расчеты проводились в рамках *GW*-приближения [9], моделирующего собственную энергию квазичастиц произведением функции Грина и динамически экранированного кулоновского потенциала [10] в программном комплексе VASP [11]. Для расчета функций отклика использовались как приближение случайных фаз, так и приближение в рамках теории функционала плотности.

Авторы выражают благодарность Министерству образования за финансовую поддержку (соглашение №14.587.21.0002, идентификационный номер RFMEFI58714X0002).

1. Rosa A., Ricciardi G., Baerends E. J., Zimin M. et al., Inorg. Chem. 44, 19 (2005).
2. Ray P. C. et al., Chem. Phys. Lett. 419, 4 (2006).
3. Li C. et al., J. Phys. Chem. B. 108, 28 (2004).
4. Balzani V. et al., Chem. Eur. J. 14, 1 (2008).
5. Lovett J. E. et al., J. Am. Chem. Soc. 131, 38 (2009).
6. Sedghi G. et al., J. Am. Chem. Soc. 130, 27 (2008).
7. Kan J. et al., Inorg. Chem. 52, 15 (2013).
8. Demel J. et al., Inorg. Chem. 52, 5 (2013).
9. Aulbur W. G. et al., Academic Press N. Y. 44, 1 (2000).
10. Shishkin M. et al., Phys. Rev. B. 75, 235102 (2007).
11. Shishkin M. et al., Phys. Rev. B. 74, 035101 (2006).

Динамика доменных границ в феррите-гранате вблизи температуры магнитной компенсации

М. З. Шарипов¹, Б. Ю. Соколов²

¹ Бухарский инженерно-технологический институт, Бухара, Узбекистан

² Национальный университет Узбекистана им. М. Улугбека, Ташкент, Узбекистан

Исследования динамики колебаний доменных границ в $Tb_3Fe_5O_{12}$ под действием низкочастотного магнитного поля вблизи температуры магнитной компенсации были выполнены в [1] магнитооптическим методом, основанном на эффекте Фарадея. Экспериментально исследовалась температурная зависимость угла фарадеевского вращения в области $200 \leq T \leq 295$ К, включающей точку компенсации $Tb_3Fe_5O_{12}$. Измерения угла Φ_F проводились по интенсивностной методике в переменном магнитном поле, изменяющемся по гармоническому закону.

Используемая модель движения доменных границ достаточно хорошо описывает экспериментальные результаты. Это означает, что наблюдаемое немонокотное изменение эффекта Фарадея в $Tb_3Fe_5O_{12}$ в окрестности точки компенсации определяется резонансным поведением величины смещения доменных границ из положения равновесия под действием переменного магнитного поля. По имеющимся данным собственные частоты колебаний доменных границ в редкоземельных ферритах-гранатах при комнатной температуре $\sim 10^5$ Гц [2], однако видно, что вблизи T_c (при $M_s \rightarrow 0$) $m \rightarrow \infty$ и, следовательно, собственная частота колебаний доменной стенки $\omega_0 = (k/m)^{1/2} \rightarrow 0$, т.е. при приближении температуры к точке компенсации резонансные частоты поля $H = H_0 \cos \omega t$ существенно сдвигаются в низкочастотную область.

Следует, что с ростом ω максимумы кривой $x(T)/x_{\max}$ смещаются вправо и влево от T_c , что согласуется с экспериментальными результатами Любопытнo, что в отличие от колоколообразной формы классических кривых магнитных резонансов, зависимость $x(T)/x_{\max}$ помимо уже отмечавшегося достаточно протяженного «нулевого» участка имеет крылья, где величина смещения доменных границ растет при удалении от точки резонанса.

1. Б. Ю. Соколов, М. З. Шарипов, ЖЭТФ. 143, 5 (2013).

2. Л. М. Дедух, В. И. Никитенко, А. А. Полянский, ЖЭТФ. 79, 2 (1980).

**Квантовый размерный эффект при отражении пучка электронов,
падающего под малым углом скольжения
на тонкую монокристаллическую пленку,
с учетом среднего внутреннего потенциала решетки**

С. М. Шкорняков

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

В настоящем докладе приведены вывод аналитических формул, расчет по ним и графическая иллюстрация задачи о КРЭ (квантовом размерном эффекте) при отражении пучка электронов средней и высокой энергий от тонкой монокристаллической пленки при малом угле скольжения α падающих электронов. В отличие от предыдущей работы автора [1] здесь учитывается средний внутренний потенциал кристаллической решетки пленки. Предлагаются методы экспериментального наблюдения эффекта. Проводится анализ и обсуждение результатов расчета и методов экспериментального наблюдения явления.

1. Шкорняков С.М. // Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед. 2013. № 2. С. 99.

Термализация холодных нейтронов на жидкостной мишени

Й. Шмайснер^{1, 2}, А. Н. Тюлюсов^{1, 2}

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

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

Широко используемым ядерно-физическим методом исследования вещества является метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Он применяется для исследования объектов, имеющих надатомные размеры, таких, как структурные неоднородности в твердых телах, коллоидные частицы и взвеси. В качестве образца может использоваться взвесь рассеивающих частиц в растворителе, которым чаще всего выступает вода комнатной температуры, что удобно при исследовании биологических объектов.

Данные экспериментальных наблюдений на малоугловом дифрактометре KWS-2 [1] показали, что при прохождении мишеней, содержащих воду, пучок содержит нейтроны с энергиями, соответствующими температуре рассеивающей среды. Появление примеси нейтронов с меньшей длиной волны искажает малоугловые спектры, что может привести к ошибкам в определении параметров рассеивателей.

Рассмотрен эффект термализации в приближениях однократного и двукратного рассеяния и проведено численное моделирование процесса.

1. E. Babcock, Z. Salhi, M-S. Appavou, A. Feoktystov, V. Pipich, A. Radulescu, V. Ossovyi, S. Staringer, A. Ioffe, Polarization analysis with ³He spin filters for separating coherent from incoherent scattering in soft matter studies, PNCMI 2012.

Рамановская спектроскопия изотопически чистых ^{12}C , ^{13}C и изотопически смешанных $^{12,5}\text{C}$ изотопов алмаза при высоких давлениях

*П. В. Энкович¹, С. Г. Ляпин¹, А. П. Новиков¹, Х. Канда²,
В. В. Бражкин¹, С. М. Стишов¹*

¹ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Национальный институт материаловедения, Цукуба, Ибараки, Япония*

Большой интерес к изучению изотопически чистых алмазов связан с обнаружением заметного влияния изотопического состава на динамику решётки, а также электронные свойства алмаза [1].

Результаты большинства исследований [2] посвящённые изучению барических зависимостей объёмов и оптических частот фононов в изотопах алмаза могут быть условно поделены на две группы. Первая группа исследований включает те работы, в которых объёмный модуль упругости B для изотопа ^{13}C оказался больше чем для ^{12}C ($B^{13} > B^{12}$), а во второй группе наоборот меньше ($B^{13} < B^{12}$).

Мы провели прецизионные рамановские исследования моноизотопов алмаза ^{12}C , ^{13}C и изотопа алмаза смешанного состава $^{12,5}\text{C}$ в рекордном диапазоне давлений до 73 ГПа с использованием гелия как наиболее гидростатической среды, передающей давление. Обнаружено, что квантовый эффект – отличие отношения рамановских частот алмазов ^{12}C и ^{13}C от классического значения (1,0408) нарастает до 30 GPa и далее убывает до 60 ГПа. Таким образом, наблюдается инверсия степени «квантовости» алмаза при сжатии. На основании полученных данных проведена оценка того, что максимально возможное различие модулей сжатия изотопов ^{13}C и ^{12}C не превышает 0,1 %. Исследование изотопически смешанного алмаза $^{12,5}\text{C}$ показывает, что эффективная масса, определяющая рамановскую частоту, меняется при сжатии от 12,38 а.е.м. при нормальном давлении до 12,33 а.е.м. при давлении 73 ГПа. Полученные экспериментальные данные являются тестом для первопринципных расчетов относительного вклада нулевой энергии в алмазе в полную энергию и эффектов изотопического беспорядка при сжатии.

1. C.P. Herrero, J. Phys.: Condens. Matter 13: 5127–5134 (2001).

2. Ph. Gillet, et al., Phys. Rev. B 60: 14660-14664 (1999).

Изучение оптических свойств наночастиц благородных металлов в стекле методом дискретных диполей

*К. А. Яблуновский¹, Н. А. Булат¹, Л. А. Авакян¹, М. Дюбель²,
В. В. Срабионян¹, В. В. Прядченко¹, Л. А. Бугаев¹*

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

² Department of Physics, University of Halle-Wittenberg, Halle, Germany

Формирование металлических наночастиц в диэлектрических матрицах тщательно изучается, поскольку такие нанокомпозитные материалы проявляют линейные и нелинейные оптические свойства, определяемые поверхностным плазмонным резонансом (ППР) наночастиц. Наночастицы серебра в стеклах привлекают особое внимание, поскольку длины волн их ППР явно отделены от длин волн межзонного поглощения [1], что делает такие материалы перспективными для применения в оптоэлектронике и наноплазмонике.

Описание свойств металлических наночастиц и в частности плазмонный резонанс является одной из основных задач плазмоники, фотоники и т. д. Если размер частиц много меньше длины излучения, то модель может быть описана как модель рэлеевского рассеяния, при размерах наночастиц сравнимых с длиной волны излучения поглощение света сферическими наночастицами может быть описано с помощью теории Ми для электромагнитного поля.

В данной работе представлены результаты моделирования плазмонного резонанса наночастиц благородных металлов методом дискретных диполей (МДД), а также сопоставление с результатами теории Ми. Исследовано влияния параметров расчета, а также размера и формы частиц на получаемый спектр оптического поглощения.

1. M. Dubiel, J. Haug, H. Kruth, H. Hofmeister, K.-D. Schicke, Mater. Sci. Eng. B. 149 (2008) 146–151.

Недостатки и противоречия концепции рассеяния нейтронов на фрактальных объектах

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 представлен подход для расчета корреляционной функции изотропной фрактальной частицы, основанный на анализе полуэмпирического выражения для сечения рассеяния нейтронов. В этом подходе профиль сечения рассеяния нейтронов рассматривается как наблюдаемое свойство фрактальной частицы. В модели учитываются два основных параметра частицы: конечный размер ξ и степень ее фрактальности D , детектируемые через призму малоуглового нейтронного рассеяния. Корреляционная функция $\gamma(r)$ для объемных и поверхностных фракталов описывается общим выражением и пропорциональна функции Макдональда $(D-3)/2$ -ого порядка, помноженная на степенную функцию $(D-3)/2$. Показано, что асимптотика корреляционной функции в пределе $r/\xi < 1$, как для объемных, так и для поверхностных фракталов, совпадают с соответствующими корреляционными функциями неограниченных фракталов.

При $2 < D < 3$ корреляционная функция соответствует объемному фракталу с $D = Dm$, а при $3 < D < 4$ - поверхностному с $D = 6 - Ds$, где Dm и Ds - фрактальные размерности объемного и поверхностного фрактала. В методе спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов [1,2] измеряется одномерная корреляционная функция $G(z)$, которая для фрактальной изотропной частицы описывается аналогичным выражением, со сдвигом индекса функции Макдональда и показателя степенной функции на $1/2$.

Пограничный случай перехода от объемного к поверхностному фракталу, соответствующий кубической зависимости сечения рассеяния нейтронов Q^{-3} , приводит к точному аналитическому выражению для одномерной корреляционной функции $G(z) = \exp(-z/\xi)$, а асимптота корреляционной функции в области фрактального поведения при $r/\xi < 1$ пропорциональна $\ln(\xi/r)$. Это соответствует особому типу самоподобия с аддитивным законом масштабирования, а не мультипликативным, как в случае объемного фрактала.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 14-22-01073 офи-м).

1. M.Th. Rekveldt, J.Nucl.Instr.Meth. B 114, (1996) 366.

2. Krouglov T., de Schepper I.M., Bouwman W.G., et al., J.Appl.Cryst. 36 (2003) 117.

**Исследование агрегатов белка BSA
методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения**

Л. А. Азарова, Н. А. Григорьева, М. И. Арефьев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Метод малоуглового рассеяния рентгеновского излучения находит широкое применение в различных областях науки. Посредством этого метода можно получать информацию о форме и строении огромного числа материалов: поверхностно-активных веществ, различных дисперсных систем, эмульсий, волокон, катализаторов, полимеров и нанокompозитов, жидких кристаллов, получать качественные и количественные характеристики исследуемых объектов. В частности, с помощью этого метода возможно исследовать трёхмерные структуры белковых молекул в растворах [1].

Бычий сывороточный альбумин (БСА) в растворе существует в виде мономера и высших агрегатов. Альбумин имеет широкий спектр применения, как в качестве модельного белка, так и в клинической практике, фармацевтических препаратах, диагностических реагентах [2]. Известно, что в подходящих условиях почти все белки могут претерпевать частичную агрегацию. Агрегаты образуются как результат стремления системы к состоянию с наименьшей свободной энергией; процесс агрегации может произойти при белковых конформационных изменениях [3].

Целью данной работы явилось исследование агрегатов белка BSA методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения.

На основании анализа шести кривых малоуглового рассеяния при различных концентрациях можно сделать вывод о том, что бычий сывороточный альбумин в натрий-фосфатном буфере при $pH = 6,8$ агрегирует и образует фибриллы, которые могут быть описаны моделью правильных цилиндров с длиной, равной, по крайней мере, 100 нм и диаметром в 4,5 нм. Что подтверждается моделированием в программе Massha пакета ATSAS. Также на основании моделирования мы можем сделать предположение о том, что в растворе присутствуют не только большие цилиндрические агрегаты, но и агрегаты существенно меньшего размера и одиночные белки. В качестве дальнейших исследований может являться уточнение структуры фибрилл, а также установление физико-химических причин их возникновения и стабильности.

1. Svergun D.I and Koch MHJ (2003). "Small-angle scattering studies of biological macromolecules in solution". *Rep. Prog. Phys.* **66** (10): 1735–82.
2. Ragheb F. Atmeh, Isam M. Arafa, and Maysoon Al-Khateeb " Albumin Aggregates: Hydrodynamic Shape and Physico-Chemical Properties" // *Jordan Journal of Chemistry* Vol. 2 No.2, 2007, pp. 169-182
3. Nikolaj K. Holm , Stine K. Jespersen, Lise V. Thomassen, Tine Y. Wolff, Pankaj Sehgal, Line A. Thomsen, Gunna Christiansen, Christian Beyschau Andersen, Anders D. Knudsen, Daniel E. Otzen "Aggregation and fibrillation of bovine serum albumin"; // *Biochimica et Biophysica Acta* 1774 (2007) 1128 – 1138.

Статус время-проекционной камеры (TPC) для многоцелевого детектора (MPD) проекта NICA

А. Г. Бажажин

*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ФВЭ,
коллораация TPC MPD/NICA, Дубна, Россия*

В рамках научной программы по изучению горячей и плотной барионной материи в ОИЯИ реализуется проект по созданию нового ускорительного комплекса на встречных пучках NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) на базе существующего ускорителя Нуклотрон-М.

Новый ускорительный комплекс позволит исследовать свойства плотной барионной материи при столкновении тяжелых ионов в широком диапазоне атомных масс – от p - p столкновений в диапазоне по энергиям $\sqrt{S_{pp}} = 12 \div 27$ ГэВ/н и $d+d$ при энергиях $\sqrt{S_{NN}} = 4 \div 13,8$ ГэВ/н со средней светимостью $L = 10^{32} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ до $Au^{+79}+Au^{+79}$ столкновений в диапазоне по энергии $\sqrt{S_{NN}} = 4 \div 11$ ГэВ/н при средней светимости $L = 10^{27} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ (Au^{+79}).

Коллайдер предусматривает две точки пересечения пучков, в одной из которых будет располагаться экспериментальная установка Многоцелевой детектор (MultiPurpose Detector – MPD).

Создание установки MPD будет осуществляться в несколько этапов. В первую очередь будет реализована следующая конфигурация установки: время-проекционная камера (Time-Projection Chamber – TPC), время-пролетная система (Time-of-Flight – TOF), калориметр под нулевыми углами (Zero Degree Calorimeter – ZDC), быстрый передний детектор (Fast Forward Detectors – FFD), электромагнитный калориметр (Electromagnetic calorimeter – Ecal).

TPC является основным трековым детектором и детектором идентификации частиц в цилиндрической части установки MPD.

TPC будет обеспечивать:

- эффективную регистрацию треков заряженных частиц в области псевдобыстрот $|\eta| \leq 1,2$,
 - импульсное разрешение $\sim 3\%$ для частиц с энергией в пределах $0,1 < p_t < 1$ ГэВ/с,
 - двухтрековое разрешение – около 1 см,
 - разрешение dE/dx – не хуже 8 %
- при множественности до 1000 заряженных частиц в центральных столкновениях и частоте событий ~ 7 кГц.

В докладе представлены конфигурация установки MPD и детектора TPC. Основные геометрические параметры и характеристики TPC. Приведена концепция оснастки для сборки TPC. Приведено описание подсистем TPC: охлаждения, газовой, считывания данных.

Результаты моделирования формы электрического поля в дрейфовом объеме время-проекционной камеры (TRC) для многоцелевого детектора (MPD) коллайдера NICA

А. Г. Бажажин

*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ФВЭ,
коллорація TRC MPD/NICA, Дубна, Россия*

TRC расположена в центральной части детектора MPD и является основным его трековым детектором, регистрирующим заряженные частицы. Важной частью TRC является система формирования однородного электрического поля в её дрейфовом объеме (field cage).

Однородное электрическое поле внутри TRC создается системой формирующих электродов (field cage), представляющих из себя ленты алюминизированного майлара. Они располагаются с шагом 15 мм на специальных поддерживающих трубках вдоль стенок корпуса рабочего объема TRC. Ширина полос 13 мм.

Для обеспечения требуемой точности измерения координат треков заряженных частиц в TRC неоднородность электрического поля в рабочем дрейфовом объеме детектора не должна превышать величину 10^{-4} от номинальной напряженности электрического поля. Для $\vec{E} = 140$ В/см это составляет величину 14 мВ/см.

Чтобы представлять картину неоднородности распределения электрического поля внутри рабочего объема TRC, а также оценить необходимую точность укладки лент field cage, был проведен расчёт электрического поля с использованием программного пакета ANSYS Maxwell.

Основные результаты расчётов:

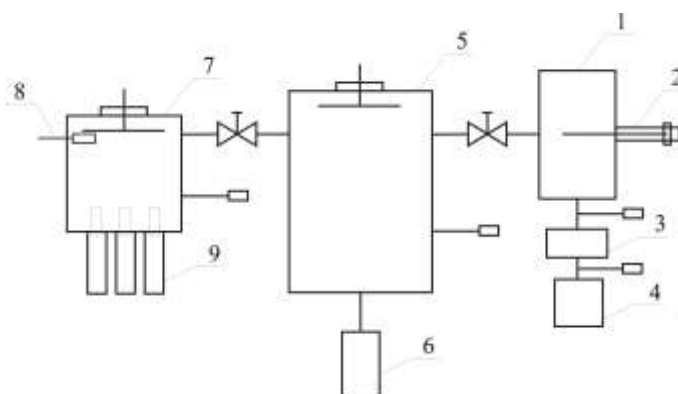
- оптимизированная система field cage обеспечивает требуемую неоднородность электрического поля (не более 10^{-4} от $\vec{E} = 140$ В/см) во всем газовом объеме детектора на расстоянии $L \approx 24$ мм (max) от поверхности лент, за исключением локальных мест возле HV-электрода и падовой плоскости, где максимальный размер области неоднородности поля доходит до $L \sim 11$ см;
- из результатов расчетов видно, что неточность установки лент системы field cage не должна превышать 100 мкм;
- необходимо выставлять величину напряжения на лентах системы field cage с точностью в 1 В;
- электрическое поле внутри дрейфового объема TRC имеет наибольшую область неоднородности вблизи HV-электрода и падовой плоскости. Эту область можно уменьшить путем увеличения потенциала на ближайшей к HV-электроду или падовой плоскости ленте системы field cage на 8 В. При этом область искажения электрического поля сокращается с 10,9 см до 4,6 см.

Сверхвысоковакуумная установка для формирования наноструктурированных слоев А2В6 методом термического осаждения

А. Н. Бельтюков, Р. Г. Валеев, А. И. Чукавин

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Электролюминофорные пленки на основе соединений А2В6 применяются при создании матричных дисплеев и устройств символьного отображения информации. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в последние годы, по улучшению таких параметров, как яркость и время работы, исследования в этой области остаются актуальными. Одно из направлений дальнейшего развития – это введение в электролюминесцентные излучатели наноструктурированных слоев. В частицах нанометрового размера возможно образование поверхностных центров свечения, число которых может быть существенно больше объемных центров, что должно приводить к повышению яркости свечения [1]. Кроме того, изменение морфологии приводит к сдвигам полосы излучения [2]. Ранее нами был предложен метод формирования наноструктурированных слоев А2В6 при термическом осаждении на поверхность пористого оксида алюминия и создания электролюминесцентных излучателей на их основе [3]. При осаждении в каналах пор формируются наноструктуры, морфология которых зависит от параметров пористой матрицы. Используемая нами установка фактически представляла собой высоковакуумный пост и не позволяла осуществлять контроль толщины и уровень легирования слоя в процессе осаждения. В связи с чем, была поставлена задача разработки сверхвысоковакуумной установки с возможностью контроля скорости испарения и количества осажденного материала. На рисунке представлена схема разработанной установки. В качестве основы использована установка УСУ-4, которая была дополнена камерой загрузки образцов и камерой термического осаждения. В камере осаждения устанавливаются три источника молекулярных пучков для испарения основного материала и легирующих примесей. Контроль толщины пленок производится кварцевым измерителем.



1 – камера загрузки; 2 – магнитный манипулятор; 3 – форвакуумный насос Agilent; 4 – турбомолекулярный насос НВТ-100; 5 – аналитическая камера; 6 – магниторазрядный насос НОРД-250; 7 – камера термического осаждения; 8 – кварцевый измеритель толщины

Работа выполняется при финансовой поддержке РФФ (грант № 15-19-10002).

1. В. Г. Корсаков, М. М. Сычев, В. В. Бахметьев, Конденсированные среды и межфазные границы, Том 14, №1, (2012).
2. X.S. Fang et al., Progress in Materials Science 56, 175–287 (2011).
3. Р.Г. Валеев, Д.И. Петухов, А.И. Чукавин, А.Н. Бельтюков, Письма в ЖТФ, том 42, вып. 3, 23 (2016).

Интерпретация EXAFS-спектров с помощью молекулярной динамики: сравнение классического и *ab initio* подходов

Д. Бочаров¹, А. Кузьмин¹, М. Крак², Ю. Пуранс¹

¹ *Институт физики твердого тела Латвийского университета, Рига, Латвия*

² *Институт им. Пауля Шеррера, Филлиген, Швейцария*

Спектроскопия рентгеновского поглощения – мощный инструмент для изучения локальной атомной структуры различных материалов. Тем не менее, интерпретация спектров EXAFS до сих пор является нетривиальной задачей, прежде всего из-за сложностей в описании термической неупорядоченности и трудностей в описании эффектов многократного рассеяния. В нашем исследовании мы использовали комплексный метод моделирования спектров EXAFS, в котором результаты классической и квантовой молекулярной динамики были использованы для расчёта EXAFS спектров из первых принципов с помощью метода многократного рассеяния [1] в рамках метода MD-EXAFS, разработанного ранее [2]. Расчеты проводились с помощью компьютерной программы CP2K [3] для двух систем: чистого диоксида урана, используемого, как ядерное топливо [4], и трифторида скандия, который последнее время привлекает внимание исследователей из-за его отрицательного теплового расширения в широком диапазоне температур [5].

В работе сравниваются результаты, полученные с помощью классической молекулярной динамики и молекулярной динамики из первых принципов. Преимущества и ограничения обоих подходов обсуждаются.

1. J. J. Rehr and R. C. Albers, Rev. Mod. Phys. 72, 621 (2000).

2. A. Kuzmin, R. A. Evarestov, J. Phys.: Condens. Matter 21 055401 (2009).

3. CP2K developers team, <http://www.cp2k.org>

4. A. Leenaers, L. de Tollenaere, C. Delafoy, and S. Van den Berghe, J. Nucl. Mater. 317 62 (2003).

5. B. K. Greve, K.L. Martin, P.L. Lee, P.J. Chupas, K.W. Chapman, A.P. Wilkinson, J. Am. Chem. Soc. 132 15496 (2010).

Оценка фотокаталитической активности чистых и допированных нанотрубок TiO_2 с помощью расчетов из первых принципов

Д. Боcharов, Ю. Ф. Жуковский, С. Пискунов, О. Лисовский, А. Чесноков

Институт физики твердого тела Латвийского университета, Рига, Латвия

Расщепление воды на полупроводниковых электродах, помещённых в водный электролит, является источником экологически чистого производства возобновляемого водородного топлива. Эффективность процесса расщепления зависит от относительного положения краёв запрещенной зоны. Экспериментально установлено, что ширина запрещённой зоны для объемного кристалла TiO_2 равна 3,2 эВ, что соответствует фотокаталитической активности в ультрафиолетовом свете. К сожалению, такой процесс эффективно преобразует лишь $\sim 1\%$ энергии солнечного света. Заметный рост этой эффективности фотокатализа в диоксиде титана может быть достигнут путем изменений положения краёв запрещённой зоны с помощью перехода к наноструктурам, в частности, нанотрубкам с последующим допированием нанотрубками одиночными примесями замещения C_O , Fe_{Ti} , N_O и S_O , или совместным N_O+S_O допированием. С помощью допирования ширина запрещённой зоны может быть уменьшена до 2,2 эВ, что увеличивает эффективность процесса фотокатализа до $\sim 15\%$.

В данной работе мы представляем расчёты из первых принципов для описания процессов легирования нанотрубок TiO_2 различных морфологий (тонкие (001) или (101) пластины TiO_2 , содержащие 6 или 9 атомных слоёв, и обладающих хиральностями $(n,0)$ и $(-n,n)$ для (001) и (n,n) для (101) структур, соответственно), направленных на улучшение свойств нанотрубок для фотокаталитического расщепления воды [1–4]. В работе произведён сравнительный анализ предпочтительного допирования нанотрубок и обсуждены перспективные направления исследований.

1. O. Lisovski, S. Piskunov, Yu.F. Zhukovskii, and J. Ozolins, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 38, 012057 (2012).
2. S. Piskunov, O. Lisovski, J. Begens, D. Bocharov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, J. Phys. Chem. C, 119, 18686 (2015).
3. A. Chesnokov, O. Lisovski, D. Bocharov, S. Piskunov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, Phys. Scr., 90, 094013 (2015).
4. O. Lisovski, A. Chesnokov, S. Piskunov, D. Bocharov, Yu.F. Zhukovskii, M. Wessel, and E. Spohr, Mater. Sci. Semicond. Process., 42, 138 (2016).

Фурье-анализ EXAFS-спектров с помощью фаз и амплитуд рассеяния электронов, полученных методом Хартри-Фока

Н. В. Булат, Л. А. Авакян, В. В. Срабионян, В. В. Прядченко, Л. А. Бугаев

Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия

Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS) является мощным инструментом для изучения локальной атомной структуры материалов различного происхождения, включая наноконпозиты. Протяженная тонкая структура рентгеновских спектров поглощения (EXAFS) оказывается чувствительной к деталям локального окружения атома, поглощающего рентгеновский фотон. Для выделения этой информации из EXAFS-спектров необходимо выполнить предварительный расчет фаз и амплитуд рассеяния фотоэлектрона в материале, качество которого непосредственно влияет на точность получаемых результатов, таких как межатомные расстояния и координационные числа. Существующие подходы используют итерационные процедуры самосогласования межатомного потенциала, которых, в принципе, можно избежать, используя фиксированную величину потенциала в межатомной области (“muffin-tin”-нуля) [1]. В работе представлены результаты разработки и тестирования программного комплекса HFampl, предназначенной для расчета фаз и амплитуд рассеяния в “muffin-tin”-приближении с использованием точного обменного потенциала Хартри-Фока (ХФ). Подготовлены атомные конфигурации для большинства элементов периодической системы. Тестирование комплекса на металлах, оксидах и железосодержащих водных сульфатных растворах показало хорошую применимость рассчитываемых фаз и амплитуд рассеяния для проведения высокоточного структурного анализа, позволяющего получать межатомные расстояния с точностью до 1%. Такая точность определения расстояний не уступает точности, достижимой с помощью общепринятых программных решений, но значения прочих параметров, таких как фактор учета неупругих потерь и параметр Дебая-Валлера, оказываются более реалистичными при применении фаз и амплитуд рассеяния, полученных с помощью комплекса HFampl.

1. Bugaev L., Vedrinskii R., Levin I. // Physica B: Condensed Matter . –1989. V.158. –P. 378-382.

Разработка прецизионной дрейфовой камеры для измерения скорости дрейфа электронов в газовых смесях детекторов частиц

А. Р. Валярова¹, Г. Е. Гаврилов², Д. С. Ильин^{1, 2}

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

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

Газоразрядные детекторы частиц получили широкое распространение в самых различных физических экспериментах, в том числе и на Большом Адронном Коллайдере (БАК) в CERN. Состав рабочей газовой смеси выбирается исходя из ряда взаимосвязанных факторов: конструкции, планируемой радиационной загрузки, набора требуемых характеристик детектора. На практике это приводит к использованию разнообразных газовых смесей, обуславливает поиск наиболее оптимальных смесей с точки зрения газового усиления, временных характеристик, радиационной стойкости, экологичности, стоимости.

На сегодняшний день интерес к разработке новых газовых смесей обусловлен ещё и экологическими требованиями. Дело в том, что суммарный выброс парниковых газов экспериментальных физических установок БАК сопоставим в эквивалентных единицах по углекислому газу с выбросом десятка тепловых электростанций, но при этом время жизни выбрасываемых газов в атмосфере составляет тысячелетия!

Для изучения характеристик новых рабочих газовых смесей, в частности измерения скорости дрейфа электронов при низких напряженностях полей $E = 500 \div 5000$ В/см, коэффициента газового усиления была разработана компактная дрейфовая камера. В работе представлен результат моделирования детектора в программном пакете Garfield (CERN).

Для обеспечения однородности электрического поля оптимизирована геометрия детектора, выбраны потенциалы на полеформирующих электродах. Получены коэффициенты газового усиления, скорости дрейфа электронов для тестовых газовых смесей ($\text{Ar}/\text{CO}_2/\text{CF}_4$, Ar/CO_2) при различных напряжениях, проведена симуляция эксперимента при прохождении быстрых электронов (источник Sr-90), и соответствующий импульс тока на аноде.

1. D. Yangd, G. Chend et al. Properties of potential Eco-friendly gas replacements for particle detectors in High-Energy Physics, CERN-OPEN-2015-004, 02 May 2015.

2. R.Veenhof. Garfield - A drift chamber simulation program, CERN Program Library W5050, 1984.

Взаимодействие пучков электронов со структурированными поверхностями при скользящих углах падения

*К. А. Вохмянина, В. С. Сотникова, А. С. Кубанкин,
А. А. Каплий, А. В. Сотников*

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Возможности излучения заряженных частиц, движущихся над структурированной поверхностью, достаточно хорошо изучены теоретически и экспериментально [1–3]. Основной проблемой, ограничивающей возможность использования излучения, генерирующегося подобным образом, является сложность реализации режима, при котором все заряженные частицы движутся вблизи структурированной поверхности радиатора в одинаковых условиях. В данной связи актуальной задачей является сжатие пучка заряженных частиц, что позволит уменьшить разброс прицельных параметров взаимодействующих с радиатором частиц.

В настоящей работе приводятся результаты исследования возможности управления параметрами пучка заряженных частиц при его взаимодействии со структурированной поверхностью – дифракционной решёткой на диэлектрической подложке. Результаты исследования демонстрируют возможность уменьшения суммарного прицельного параметра электронов пучка, взаимодействующих с мишенью, что открывает возможность увеличить эффективность источников излучения, основанных на дифракционных механизмах излучения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования России проект №14.578.21.0063 (RFMEFI57814X0063).

1. S.J. Smith and E. M. Purcell, Phys. Rev.1953, 92, 1069.
2. P.M. Van den Berg, J. Opt. Soc. Am. 1974, 64, 325.
3. A.Gover, P.Dvorkis, U.Elisha, J.Opt. Soc. Am. B, 1984.

Проверка и анализ соотношений Кальоти методом численного моделирования

А. У. Гайсин^{1,2}, К. А. Павлов^{1,2}, Е. В. Москвин^{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 в Петербургском институте ядерной физики (ПИЯФ НИЦ КИ) подходит к завершению строительство высокопоточного исследовательского реактора ПИК. Концепция приборной базы реактора содержит широкий спектр нейтронных инструментов, требующих новых подходов при проектировании и построении. Моделирование в программном пакете McStas [1, 2], реализующем метод Монте-Карло для нейтронного рассеяния, зарекомендовало себя как эффективное средство для оптимизации подобных установок.

Целью данной работы является опытное подтверждение соотношений Кальоти [3] методом численного моделирования. Уравнения Кальоти для нейтронной дифракции на поликристаллических образцах характеризуют зависимость разрешения и светосилы эксперимента от параметров основных элементов установки: угловой расходимости коллиматоров и мозаичности кристалла-монокроматора.

В программном пакете McStas была создана модель порошкового дифрактометра на кристаллическом монокроматоре, позволяющая проверить результаты, представленные в работе Кальоти [3]. В рамках модели был получен ряд зависимостей полуширины и интенсивности дифракционного пика от инструментальных параметров.

1. K. Lefmann and K. Nielsen, Neutron News, 10 (1999), 20.

2. P. Willendrup, E. Farhi, et al, User and Programmers Guide to the Neutron Ray-Tracing Package McStas, Version 1.8 (2004).

3. G. Caglioti, A. Paoletti, F.P. Ricci, Nuclear Instruments and Methods, 3 (1958), 223.

Влияние влаги на деградационные процессы в суперконденсаторах, приводящие к газовыделению и ускоренному старению

*Р. Р. Галимзянов, А. Т. Калашник, С. В. Стаханова, И. С. Кречетов,
А. А. Климонт, М. В. Астахов*

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

Суперконденсатор (СК) представляет собой импульсное электрохимическое устройство, в котором накопление заряда происходит в форме свободного заряда двойного электрического слоя на границе «электрод-электролит». Энергоемкость СК существенным образом зависит от свойств электролита, поскольку напряжение СК определяется его электрохимическим окном. СК на основе органических электролитов. СК с органическими электролитами имеют более высокую удельную энергию.

Также, одной из трудностей при изготовлении современных суперконденсаторов на основе органических электролитов является обеспечение отсутствия следовых количеств воды, которая приводит к возникновению деградационных процессов и ускоренному старению СК. Поэтому было исследовано влияние влаги на деградационные процессы, приводящие к газовыделению и ухудшению удельных характеристик.

В качестве объекта исследования был выбран промышленно выпускаемый СК фирмы Nesscap, на основе органического электролита. Методом газовой хроматографии и масс-спектрометрии было установлено, что содержание влаги в данных СК чрезвычайно мало ($< 1 \text{ ppm}$), которое совершенно не влияет на удельные характеристики – после 40 тыс циклов емкость уменьшилась на 0,5 % по отношению к исходным данным (с 1207 до 1200Ф).

В связи с чем, была поставлена задача по исследованию влияния внесенной влаги в систему на удельные характеристики, а также анализ газов, образуемых в объеме СК.

Было показано, что с увеличением количества влаги в системе емкость суперконденсатора уменьшается. Методом газовой хроматографии и масс-спектрометрии были установлены составы газов, образующихся в процессе деградации СК и были изучены процессы старения СК сопровождающиеся газовыделением.

Application of electrophysical processes for solution of ecological problems of power generation systems

H. J. Huseynov

Institute of Physics of Azerbaijan National Academy of Sciences, Baku, Azerbaijan

In this article, removal of H₂S from natural gas, sulphur compounds from mazout and hazardous components from fume by using adsorption processes under effects of strong electric fields and gas discharges are described.

Developments in power generation, chemical industry and other fields of production of the world countries have created certain ecological problems requesting urgent solutions by the end of the XX century. Among these problems are depletion of the ozone layer, global warming and acid rains. Scientific research centres of the developed countries are carrying perfect scientific reasearch out to solve these problems [1, 2].

Use of methane as heat source requests certain ecological demands. If there are H₂S and/or other sulphur components in the methane, pre-treatment is a must. Leakage of methane gas during its production and transmission triggers certain chemical reactions in the atmosphere. Monitoring of methane gas in the atmosphere has its own importance.

Concerning the above mentioned, reasearch work on the effects of power generation on the ecology and preventing this pollution has importance. In the light of so far mentioned, in this article research on solution of ecological problems of power generation by application of adsorption processes under electric discharge condition are described.

In this work, H₂S mercaptan, CO, CO₂, CH₄, mazout , NO_x, SO_x, NaX, CaA substances are used as research subject. In the experiments, flight time, MSX-4 model mass spectrometer is used. It should be noted that there are two ways of obtaining special materials with the aplication of modern technology:

The first method is synthesis of new chemical compounds and the second is to make existing materials to gain new properties according to demand.

1. Ларин И.К., Угаров А.А. Климатический прогноз на 2000-2100 годы. II. Роль атмосферных химических процессов в изменении климата // Химическая физика. 2003. Т. 22. № 4. с. 21–28.

2. Brenner S., Havlin S., Bunde A. et al. Long-range Correlations and Trends in Global Climate Models: Comparison with Real Data // Physica. A: Stat. Mech. and its Appl., 2001, v. 294, p. 239-248.

Хемо-электронная конверсия энергии в нанопорошковых системах на основе ZrO_2

*А. С. Дорошкевич^{1, 2}, А. В. Шило², А. И. Любчик³, А. К. Кириллов⁴,
В. А. Глазунова⁷, Г. К. Волкова⁷, Т. Ю. Зеленьяк⁵, В. В. Бурховецкий³,
Г. А. Троицкий⁴, Т. А. Василенко³, В. А. Турченко^{1, 2}, В. И. Боднарчук¹,
В. С. Дорошкевич⁸, Х. Т. Холмуродов¹, Т. Е. Константинова²*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Киев, Украина

³ REQUIMTE, Universidade Nova de Lisboa, Caparica, Portugal

⁴ Институт физики горных процессов НАН Украины, Днепрпетровск, Украина

⁵ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

⁶ Институт физики полупроводников им. В. Е. Лошкарева НАН Украины, Киев, Украина

⁷ Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,
Донецк, Украина

⁸ Донецкий национальный университет, Донецк, Украина

Крайне неравновесная термодинамически поверхность нанопорошковых систем обладает особыми физико-химическими свойствами и может представлять интерес, для альтернативной энергетики. Так, ввиду уникального сочетания ряда физических и химических свойств, поверхность ZrO_2 -наночастиц для снижения поверхностной энергии адсорбирует химически молекулы воды из атмосферы. Этот процесс имеет экзотермический характер. Цель данной работы состоит в разработке способа отбора избытка энергии, выделяющейся при адсорбции воды нанопорошковой системой, в виде электрического заряда – «хемо-электронной конверсии». Возможность реализации этого эффекта впервые была показана на объемных материалах [1].

В настоящий момент получены опытные образцы хемо-конверторов на основе нанопорошков состава ZrO_2 -3мол% Y_2O_3 с размером частиц 7,5 нм, работающие в периодическом режиме (генерация / увлажнение – восстановление / просушивание) и развивающие мощность до 400 нВт.

Авторы работы благодарят за поддержку проект H2020/MSCA/RISE/HUNTER/691010 и грант № 16-33-50010 РФФИ.

1. В.В.Стыров, И.А.Николаев Ю.И.Тюрин, Теор. и эксп. хим. 67, Т.16, № 1 (1980).

Моделирование и экспериментальное исследование неколлинеарной компоненты намагниченности в инвертированных опалах

*И. С. Дубицкий^{1, 2}, А. В. Сыромятников^{1, 2}, Н. А. Григорьева¹,
А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Шишкин^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}*

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

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

Магнитные наноструктуры, в которых реализуется состояние спинового льда, проявляют неожиданные свойства вследствие вырожденности основного состояния и наличия в таких структурах хорошо локализованных объемных магнитных зарядов [1]. В основном, они представляют собой либо двумерные массивы наночастиц, либо сплошные пленки с периодически расположенными пустотами.

В работе [2] на основании анализа данных по малоугловому рассеянию нейтронов была высказана гипотеза о принадлежности инвертированных опалов к семейству искусственных спиновых льдов. Они могут быть получены из коллоидных кристаллов, составленных из расположенных в узлах ГЦК решетки микросфер, посредством заполнения пустот между микросферами ферромагнитным металлом с последующим удалением самих сфер. В результате образуется периодическая ферромагнитная сеть наноузлов, связанных между собой ножками-перемычками. При достаточной анизотропии формы ножек их магнитные моменты можно считать изинговскими, при этом минимум обменной энергии и энергии размагничивающего поля достигается в состоянии, которое можно описать с помощью правила спинового льда. Выполнение правила спинового льда в инвертированных опалах должно приводить к ряду необычных свойств. В частности, при приложении внешнего магнитного поля вдоль оси $[1\bar{2}1]$ должна возникать компонента намагниченности, направленная перпендикулярно магнитному полю. Настоящая работа посвящена проверке данного утверждения.

Результаты микромагнитного моделирования подтвердили гипотезу о выполнении правила спинового льда в распределении намагниченности в элементарной ячейке инвертированного опала. Кроме того, была вычислена величина перпендикулярной компоненты намагниченности. Исследования поверхности тонких образцов методами магнитно-силовой микроскопии показали, что вид фазового контраста поверхности инвертированных опалов во внешнем поле, находится в согласии со следствиями модели спинового льда.

1. Nisoli, C., Moessner, R., & Schiffer, P. (2013). *Reviews of Modern Physics*, 85(4), 1473.

2. Mistonov, A. A., Grigoryeva, N. A., Chumakova, A. V., Eckerlebe, H., Sapoletova, N. A., Napolskii, K. S., & Grigoriev, S. V. (2013). *Physical Review B*, 87(22), 220408.

Взаимодействие кластеров наночастиц благородных металлов с электромагнитным излучением на частоте плазмонного резонанса

А. О. Ермолович, А. Л. Данилюк

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Данная работа посвящена изучению процессов поглощения и рассеивания фотонов на наночастицах благородных металлов на пленках диоксида титана, а также влияния плазмонных эффектов на усиление электромагнитного поля вблизи исследуемых частиц.

Каталитические свойства наночастиц металлов в фотокаталитических реакциях наблюдаются во многих экспериментах. В связи с тем, что данные явления наблюдаются прямо на поверхности наночастиц при облучении светом низкой интенсивности определенной частоты, предполагается, что данные свойства являются проявлением возбуждения локализованных поверхностных плазмонов на наночастицах металла.

Расчет спектров рассеивания и поглощения наночастиц благородных металлов на пленках диоксида титана осуществлялся посредством программного пакета МЕЕР (MIT Electromagnetic Equation Propagation) [3], реализующий метод конечных разностей во временной области. Рассмотрены различные конфигурации частиц благородных металлов, таких как золото, серебро и платина, характеристические размеры которых не превышали 150 нм.

В результате моделирования наноразмерных структур исследованных металлов были получены спектры рассеивания и поглощения фотонов на наночастицах. Рассчитаны значения усиления электромагнитного поля вблизи наночастиц на резонансной частоте плазмонных колебаний, равной приблизительно 400 нм, также была получена временная зависимость коэффициента усиления электромагнитного поля на частоте плазмонного резонанса.

Полученные результаты позволяют сделать выводы об оптических свойствах отдельных наночастиц и их кластеров, что позволит в дальнейшем получать наноструктурированные материалы с заданными свойствами.

1. Zhou, X., Liu, G., Yu, J. & Fan, W., J. Mater. Chem. 22, 21337–21354 (2012).
2. Marimuthu, A., Zhang, J. & Linic, S., Science 339, 1590–1593 (2013).
3. Ardavan F. Oskooi, David Roundy, et al., Comput. Phys. Commun. 181, 3 (2010).

Примеры одно- и двумерных алгоритмов субпиксельной точности

И. Л. Жогин

НПП «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

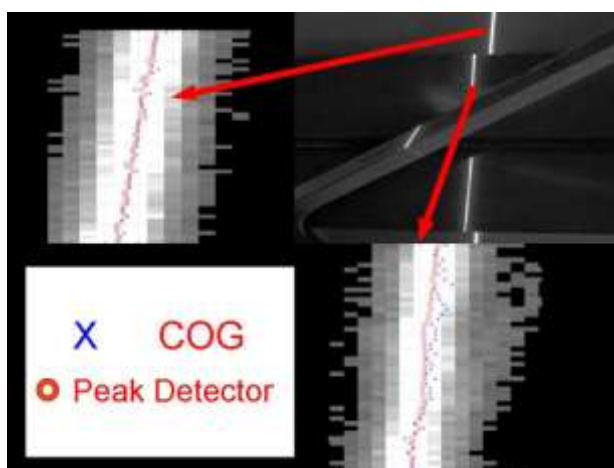
Одномерный алгоритм субпиксельной точности задействован в счетном рентгеновском детекторе ОД-3М, где координата фотона соотносится с центром лавины, образующейся в дрейфовом промежутке детектора [1]. Координата центра лавины вычисляется по зарядам, наведенным на три соседних стрипа (максимум в среднем стрипе), с точностью более высокой (~ 0,1 мм), чем шаг стрипов (~ 5 мм). Плотность заряда около центра лавины имеет вид (росток из двух членов)

$$f(x) = A - p(x - u)^2/2 + \dots, \quad (1)$$

а заряд стрипа определяется её интегралом по ширине стрипа. По зарядам трех стрипов a, b, c можно вычислить три параметра этого ростка. Для координаты центра, u ($|u| \leq 1/2$, шаг стрипов = 1), получаем следующее выражение:

$$2u = (c - a)/(2b - a - c); \text{ если } b = c, \text{ то } u = 1/2. \quad (2)$$

Похожей двумерной задачей является определение центра лазерной линии в изображении 3D-камеры (измерение высоты объектов методом лазерной триангуляции). Рисунок сравнивает алгоритмы субпиксельной точности COG (center of gravity) и Peak Detector [2].



Сравнение работы алгоритмов субпиксельной точности COG (центр тяжести пика) и Peak Detector (положение максимума) [2]

Аналогично (1) можно рассматривать 2D-росток яркости лазерной линии

$$f(x, y) = A + By - (a + by)(x - u - vy)^2/2 + \dots; \quad (3)$$

шесть параметров ростка (включая координату центра и наклон) можно найти по сигналам шести пикселей, образующих прямоугольник 3×2 .

1. V.M. Aulchenko, O.V. Evdokov, et al., Nuclear Instruments and Methods. A603, 76 (2009).

2. И.Л. Жогин, В.В. Жуланов, В.М. Титов. XIX Нац. конф. по синхротронному излучению. Сборник тезисов. Новосибирск: 2012, 78.

3. www.photonfocus.com/fileadmin/web/manuals/MAN065_e_V1_0_MV1_D1024E_3D02.pdf

Влияние имитаторов продуктов деления на структуру и фазовый состав модельного топлива

Н. А. Иванова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

В ядерной энергетике существует постоянная тенденция к повышению экономичности работы атомных электростанций, что проявляется, в частности, в увеличении глубины выгорания ядерного топлива. При глубоком выгорании за счет накопления продуктов деления происходит существенное изменение его химического и фазового состава, что, естественно, оказывает влияние на свойства топлива. Важное значение для прогнозирования поведения оксидного топлива в процессе выгорания имеют его термодинамические характеристики, и особенно, его кислородный потенциал, который определяет химическое состояние продуктов деления и степень окисления внутренней поверхности оболочки твэла.

Ввиду сложности и трудоемкости работы с облученным топливом, перспективным является вне реакторное исследование свойств модельного оксидного ядерного топлива, содержащего имитаторы продуктов деления, количество которых соответствует определенной глубине выгорания.

Целью настоящей работы являлось исследование влияния продуктов деления на кислородный потенциал модельного топлива, имитирующего изменение состава и структуры диоксида урана при высоких выгораниях.

Спеченные таблетки исследовали на равномерность распределения имитаторов продуктов деления как с помощью химического, так и микрорентгеноспектрального анализов, а также проводился рентгеновский фазовый анализ образца модельного топлива. Последний показал, что основная фаза имеет флюоритную решетку, характерную для диоксида урана. Было также установлено, что параметр решетки модельного топлива ($a = 546,97$ пм) отличается от параметра решетки нелегированного диоксида урана ($a = 547,07$ – $547,11$ пм), что свидетельствует о растворении легирующих добавок и образовании твердого раствора, а отсутствие размытия дифракционных максимумов под большими углами говорит о том, что твердый раствор является равновесным.

Если предположить, что в образце весь ZrO_2 перешел в твердый раствор, то параметр решетки был бы равен $544,70$ пм, что гораздо меньше экспериментально определенного значения. Вероятно, расхождения параметра решетки для образца можно объяснить частичным растворением ZrO_2 в UO_2 и растворением оксидов La_2O_3 , Nd_2O_3 , Y_2O_3 в матрице топлива, что должно приводить к увеличению параметра решетки.

Модернизация монокристалльного нейтронного дифрактометра МОНД на реакторе ИР-8

Н. Н. Исакова, Н. Ф. Мирон

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Модернизация пятикружного монокристалльного нейтронного дифрактометра МОНД с однопозиционным гелиевым детектором предпринята с целью снижения затрат времени на сбор репрезентативного массива дифракционных данных, необходимого для расшифровки структуры исследуемых веществ. Очевидно, что решительного снижения затрат времени можно достичь лишь заменив однопозиционный детектор на позиционно-чувствительный детектор (ПЧД). Вместе с тем, заметный прирост массива дифракционных данных можно получить, используя нейтроны с меньшей длиной волны. Таким образом, модернизация дифрактометра МОНД включает использование ПЧД и снижение длины волны монохроматических нейтронов.

ПЧД использованный в дифрактометре МОНД – image-plate scanner mar345 (X-Ray Research G.m.b.H.). Включение детектора mar345 в состав автоматизированного дифрактометра МОНД потребовало согласования между программным обеспечением самого детектора и управляющей программой МОНДа.

Получение монохроматического пучка нейтронов выполняется двойным монохроматором, обеспечивающим плавное изменение длины волны (λ). В данном случае использовался Cu(111), а значение длины волны нейтронов было установлено равным 1,06 Å.

Для формирования узкого пучка был сконструирован и изготовлен коллиматор переменного сечения. Формирование узкого пучка (5–7 мм) является важным аспектом, поскольку значительно упрощает обработку данных и приводит к более точным результатам.

Моделирование самолета с крылом обратной стреловидности

Е. А. Казаков, А. А. Бондарчук

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Крыло обратной стреловидности (КОС) обладает серьёзными преимуществами перед классическим крылом на большинстве режимов: сверхманёвренность на малых скоростях, повышенная надёжность на режимах взлёта и посадки, меньшая эффективная площадь рассеяния, меньшая радиолокационная заметность, большая удельная подъёмная сила. При всех этих неоспоримых достоинствах, КОС обладает существенным недостатком. Опасное явление флаттера, возникающее в момент перехода на сверхзвуковой режим, до сих пор не удалось преодолеть.

Самый простой способ сделать это – изменить конструкцию аэроплана так, чтобы исключить столкновение потоков, но это решение, однако, приведёт к непомерно высоким требованиям к жёсткости крыла. Добиться выполнения этих требований можно, используя современные композитные материалы. На выяснение структуры, которой должен обладать искомый материал, и направлена моя текущая работа.

Менее радикальный способ – вносить в конструкцию минорные изменения, не затрагивающие основной концепт (тем не менее, известны исторические случаи успеха этого метода). Я занимаюсь генерацией и проверкой этих вариативных изменений, моделируя в среде ANSYS полёты созданной мной модели аэроплана с КОС на дозвуковом и сверхзвуковом режимах.

Прохождение электронов с энергией 10 кэВ через стеклянные микрокапилляры конической формы

*А. А. Каплий, К. А. Вохмянина, В. С. Сотникова, И. А. Кищин,
А. С. Кубанкин, Р. М. Нажмудинов, А. Н. Олейник, А. В. Сотников*

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Исследование возможности формирования пучков заряженных частиц с помощью диэлектрических каналов представляет собой актуальную задачу в связи с потенциальными возможностями создания недорогого и компактного устройства управления ионами и электронами. В настоящее время проводится ряд экспериментов по изучению прохождения электронов через диэлектрические каналы [1–4].

В данной работе проведены исследования по изучению прохождения электронов с энергией 10 кэВ через стеклянные макрокапилляры конической формы.

Результаты данного исследования демонстрируют возможность фокусировки быстрых электронов с помощью двух конических каналов различной длины и разных диаметров входного и выходного отверстий. Экспериментально показана зависимость значения тока, прошедшего через капилляр, от времени и от угла наклона капилляров относительно оси пучка. Также показано, что при определенных соотношениях входного и выходного диаметров канала плотность тока прошедшего пучка электронов может увеличиться на два порядка по сравнению с первоначальной [5].

Работа выполнена при поддержке программы Министерства образования и науки Российской Федерации для высших учебных заведений, проект государственного задания № 3.2009.2014/ К.

1. S. J. Wickramarachchi, B. S. Dassanayake, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 269, 1248-1252 (2011).
2. S. J. Wickramarachchi, T. Ikeda, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 317, 101-104 (2013).
3. S. J. Wickramarachchi, B. S. Dassanayake, et al., Phys. Scr. T 156, 014057 (2013).
4. W. Wang, J. Chen, D. Y. Yu, et al., Phys. Scr. T 144, 014023 (2011).
5. K.A. Vokhmyanina, G.P. Pokhil, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 355, 307 (2015).

Изотопические эффекты в системе Rh-H/D

Д. И. Капустин, И. А. Шолин

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

Родий, помещенный в атмосферу молекулярного водорода, образует гидрид γ_2 с составом, близким к RhH, путем изоморфного перехода $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2$ между обедненной и обогащенной водородом фазами с ГЦК решеткой металла. Давление равновесия $\gamma_1 \leftrightarrow \gamma_2$, близкое к давлению обратного перехода $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1$, приблизительно линейно возрастает от 3,7 ГПа при комнатной температуре до 4,9 ГПа при $T = 400^\circ\text{C}$. На примере системы Rh-H мы планировали проверить, насколько точен предложенный недавно [1] метод расчета фазовых диаграмм систем Me-D по известным диаграммам систем Me-H с использованием спектра плотности оптических фононов в соответствующем гидриде и дейтериде.

Результаты такого расчета сильно зависят от отношения $r = \omega^{\text{H}}/\omega^{\text{D}}$ частот оптических колебаний в гидриде и дейтериде. Ранее это отношение было определено для трех фаз-аналогов гидрида родия: $r = 1,49$ для PdH_{0,6}/PdD_{0,6} [2]; $r = 1,51$ для PdH/PdD [3] и $r = 1,43$ для NiH/NiD [1]. Спектр оптических колебаний в гидриде RhH был изучен ранее [4] методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН). Мы изготовили образец RhD весом 1 грамм, промерили его НРН спектр на светосильном нейтронном спектрометре IN1-Lagrange в ИЛЛ (Гренобль, Франция) и получили отношение $r = 1,44(2)$ для фаз RhH/RhD.

Расчет с этим значением $r = 1,44$ предсказал, что при $T = 400^\circ\text{C}$ давление равновесия $\gamma_1 \leftrightarrow \gamma_2$, в системе Rh-D должно быть примерно на 1 ГПа выше, чем в системе Rh-H. Методом закалки мы построили изотермы растворимости водорода и дейтерия в родии при 400°C , и в пределах точности измерения $\pm 0,3$ ГПа давления переходов $\gamma_2 \rightarrow \gamma_1$, на этих изотермах совпали между собой.

Возможно, возникшая проблема связана с образованием дигидрида γ_3 , обнаруженного в этой системе несколько лет назад [5]. При комнатной температуре давление образования γ_3 фазы из фазы γ_2 превышает 8 ГПа, а вот давление обратного перехода $\gamma_3 \rightarrow \gamma_2$ составляет лишь около 4,5 ГПа. Это близко к давлению равновесия $\gamma_1 \leftrightarrow \gamma_2$, что предполагает близкие значения химпотенциала водорода в фазах γ_2 и γ_3 и, соответственно, сильную ангармоничность оптических колебаний. В то же время, изменение давления равновесия $\gamma_1 \leftrightarrow \gamma_2$ при замене H на D рассчитывалось в предположении, что оптические колебания в RhH и RhD гармонические, и различаться могут только силовые константы.

1. V.E. Antonov et al., J. Alloys Compd. 580 (2013) S109.
2. J.J. Rush et al., Z. Phys. B: Condens. Matter 55 (1984) 283.
3. V.E. Antonov et al., Phys. Rev. B 80 (2009) 134302.
4. V.E. Antonov et al., J. Alloys Compd. 446–447 (2007) 508.
5. B. Li et al., PNAS 108 (2011) 18618.

Двойной монохроматор для нейтронного стресс-дифрактометра СТРЕСС на исследовательском реакторе ИР-8

И. Д. Карпов, В. Т. Эм

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Благодаря достаточно большой проникающей способности нейтронов в большинстве материалов, нейтронографический метод является единственным неразрушающим методом, позволяющим измерить распределение напряжений в объемных материалах.

Обычно в стресс-дифрактометрии используется угол монохроматора $2\theta_M \approx 90^\circ$. Для размещения типичного стресс-дифрактометра с $2\theta_M \approx 90^\circ$ необходимо большое пространство ($\sim 2,5$ м) в стороне от оси канала. При создании установки СТРЕСС на реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт», стояла проблема создания компактного, и в тоже время светосильного, стресс-дифрактометра в условиях ограниченного пространства. Использование традиционного двойного монохроматора позволяет компактнее разместить стресс-дифрактометр ближе к стенке реактора, однако, появляются большие потери в интенсивности при больших углах монохроматора.

Для стресс-дифрактометра на реакторе ИР-8 представляется оптимальным выбор двухкристального монохроматора PG002+Si220 (мозаичный кристалл и фокусирующий в горизонтальной плоскости идеальный кристалл) с фиксированной длиной волны. При указанной схеме монохроматизации достигается хорошее разрешение, а потеря в интенсивности может быть компенсирована за счёт размещения монохроматора ближе к активной зоне реактора.

Для длины волны $\lambda = 1,56 \text{ \AA}$ выходной угол для пары PG002+Si220 равен 21° , что позволяет компактно разместить прибор на канале: 0,9 м от оси канала в одну сторону и 0,7 м в другую. Такая длина волны соответствует локальному минимуму полного сечения нейтронов вблизи Брэгговского скачка (321) в ферритной стали и позволяет существенно увеличить максимальную глубину измерений.

Эксперименты проводились при мощности реактора 5 Мвт и 6 Мвт. Ширина одного канала соответствовала $0,026^\circ$. При этом разрешение $\Delta d/d = 3 \cdot 10^{-3}$. А длина пути нейтронов в ферритной стали составила ~ 80 мм.

Эксперименты показали, что выведенный пучок обеспечивает характеристики прибора сравнимые с лучшими зарубежными приборами на более мощных реакторах.

Сцинтилляционный счетчик с использованием переизлучателя длины волны

П. С. Кириленко

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

В ходе работы предполагается создание и испытание сцинтилляционного счетчика с использованием переизлучателя длины волны. Использование в конструкции счетчика переизлучателей может улучшить параметр светосбора. К торцам листа сцинтиллятора большой площади прикладывается полоска органического стекла с примесью органического красителя. Свет из сцинтиллятора изотропно переизлучается и может попасть в угол полного внутреннего отражения. Таким образом свет транспортируется к фотоумножителю, где и регистрируется. Такая конструкция позволяет использовать фотоумножители малого размера и стоимости, тогда как обычно сбор света с больших площадей сцинтиллятора требует использование дорогостоящих компонентов. В данный момент рабочий прототип детектора собран, проводится его калибровка и испытание, анализ полученных данных с помощью массива ROOT. В дальнейшие планы входит модернизация прототипа с использованием сцинтиллятора переменной толщины и замена переизлучателей на схожие с измененной толщиной и концентрацией красителя.

Работа проводится в Институте ядерной физики им. Будкера СО РАН.

Исследование электронных свойств квазидвухмерной гетероструктуры на основе кремния и германия

О. А. Козлова, В. А. Скачкова, М. С. Зеленина

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Проведено квантово-механическое моделирование основного состояния квазидвухмерных структур на основе кремния и германия с межслоевым расстоянием 2,6–3,0 Å. Выполнен расчет статического самосогласованного потенциала и зонной диаграммы у наиболее стабильной конфигурации. Основным средством моделирования являлся программный комплекс VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [1, 2].

Проведена процедура релаксации атомов в их устойчивое положение с целью отыскания наиболее стабильной структуры. Для релаксации атомов использовался метод присоединенных плоских волн (PAW-метод) в рамках методологии функции Грина с учетом экранирования кулоновского взаимодействия (GW-приближение). Получены значения свободной энергии системы, на основе чего проведен анализ стабильности исследуемых систем. Установлено, что наиболее стабильной системой является гетероструктура с межслоевым расстоянием 2,8 эВ.

Расчитано распределение электронной плотности гетероструктуры с межслоевым расстоянием 2,8 эВ. Распределение плотности состояний «спин вверх» (DOS up) совпадает с распределением плотности состояний «спин вниз» (DOS down), что свидетельствует об отсутствии магнитных свойств в исследованных структурах.

Анализ зонной диаграммы исследованной гетероструктуры показал, что в зонной диаграмме гетероструктуры максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости смещен к Γ -точке, видно слабое перекрытие валентной зоны и зоны проводимости. Ширина непрямого перехода зона-зона равна 0 эВ, таким образом данная структура проявляет свойства полуметалла.

Финансирование осуществлялось при поддержке договора БРФФИ от 23 мая 2014 г. № Ф14М-072 «Исследование в первопринципном подходе электронных свойств двухмерных наноструктур кремния и германия и гетероструктур на их основе».

1. G. Kresse. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Comput. Mat. Sci. 6 (1996), 15.
2. G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmüller. VASP the guide: tutorial. Vienna: University of Vienna (2003).

Исследование влияния деформаций дисульфида титана на стабильность вакансий

О. А. Козлова, В. Р. Стелпицкий

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Исследовано влияние деформации на термодинамическую стабильность вакансий. Проведено квантово-механическое моделирование основного состояния квазидвухмерных структур дисульфида титана (TiS_2) с различными типами вакансий в условиях внешней одноосной деформации сжатия с растяжения. Исследовались одиночные вакансии титана и серы, а также вакансионный кластер TiS_2 , наличие которого может приводить к эффекту волны зарядовой плотности [1]. Так как структура является симметричной относительно главной оси, моделирование деформации осуществлялось посредством увеличения и уменьшения вектора трансляции вдоль одной из осей на 2 % и на 4 %. Основным средством моделирования являлся программный комплекс VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [2, 3].

Выполнена процедура релаксации атомов в их устойчивое положение с целью отыскания наиболее стабильной структуры. Для релаксации атомов использовался метод присоединенных плоских волн (PAW-метод) в рамках методологии функции Грина с учетом экранирования кулоновского взаимодействия (GW-приближение). Получены значения свободной энергии системы и на их основе рассчитана энергия образования вакансий. Расчет проводился по следующей формуле:

$$E(\text{Ti}) = E(\text{Ti}_{47}\text{S}_{96}) - E(\text{Ti}_{48}\text{S}_{96}) + \mu\text{Ti},$$

где $E(\text{Ti})$ – энергия образования вакансии Ti , $E(\text{Ti}_{47}\text{S}_{96})$ – полная энергия квазидвухмерной структуры TiS_2 с вакансией Ti , $E(\text{Ti}_{48}\text{S}_{96})$ – полная энергия квазидвухмерной структуры TiS_2 , μTi – химический потенциал Ti в гексагональном дисульфиде титана.

Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что наиболее стабильными являются квазидвухмерные структуры с вакансиями титана.

1. A. S. Razinkin, A. N. Enyashin, T. V. Kuznetsova, A. N. Titov, M. V. Kuznetsov, and A. L. Ivanovskii. Atomic defects on the surface of quasi two-dimensional layered titanium dichalcogenides: STM experiment and quantum chemical simulation. *Journal of Structural Chemistry*. 51, 4 (2010) 737.
2. G. Kresse. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput. Mat. Sci*. 6 (1996), 15.
3. G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmüller. VASP the guide: tutorial. Vienna: University of Vienna (2003).

Модификация свойств Co-нанотрубок путем электронного облучения

А. Л. Козловский, М. В. Здоровец, К. К. Кадыржанов

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

Электронное облучение металлических наноструктур является эффективным инструментом для стимулирования контролируемой модификации свойств материалов, таких как структурные, оптические, электрические и магнитные. Изменяя условия облучения, свойства материала мишени могут быть изменены в желаемом направлении. Облучение вызывает структурные изменения в материале, которые непосредственно оказывают влияние на его свойства. В данной работе рассмотрено влияние электронного излучения на кристаллическую структуру и проводящие свойства нанотрубок на основе кобальта. Показано, что изменение удельного сопротивления для Co – нанотрубок, носит нелинейный характер и подчиняется полиномиальному закону $y=3E-05x^2 - 0,005x - 1,0737$. Увеличение дозы облучения приводит к перестройке кристаллической структуры Co – нанотрубок за счет снижения влияния метастабильной фазы $\beta - Co$, а также снижению количества микронапряжений создаваемых ГЦК фазой в кристаллической решетке, при этом происходит увеличение степени текстурирования образцов в процессе электронного облучения в текстурной плоскости [100]. С увеличением дозы облучения, происходит перестройка кристаллической структуры полученных нанотрубок. Количество дефектов напрямую влияет на проводящие свойства исследуемых нанотрубок.

Таким образом, облучение потоком электронов позволяет модифицировать кристаллическую структуру нанотрубок, проводить электронный отжиг дефектов, который не разрушает наноструктуры, увеличивая проводимость и снижая сопротивление нанотрубок.

Рентгеновский элементный микроанализ металлических изделий из раскопок древнего Крыма

*Н. Н. Колобылина¹, А. В. Антипенко², А. Ю. Носкова¹,
Т. Н. Смекалова^{2, 3}, Е. А. Созонтов¹, Е. Б. Яцишина¹*

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

² *Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, Симферополь, Россия*

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Применение естественнонаучных методов в настоящее время становится совершенно необходимым в практике гуманитарных исследований [1, 2].

Цель данной работы включала: отработку экспериментальной методики по изучению объектов материальной культуры Крыма и проведение исследований химического элементного состава древних металлических изделий, включавших: браслет (II–III в. н. э.) из раскопок могильника Левадки в 2015 г., Симферопольский район Республики Крым; элементы снаряжения верхового коня: элемент, в виде выпуклой бляхи с петлей, ременной гарнитуры конского оголовья (IX–VIII в. до н. э.) и псалий (IX–VIII в. до н. э.), обнаруженных на территории Белогорского района Республики Крым. Измерения элементного состава проводились на сканирующем электронно-ионном микроскопе Helios 600i (FEI Company, США) оборудованный системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа ЭДРМА (EDXS) с разрешением 128 эВ (по Mo) и микроманипулятором Omniprobe, газовой инжекционной системой (ГИС), которая позволяет напылять пленки различных материалов (на данном приборе – W, C, Pt).

В результате исследований определен элементный состав металлических сплавов древних изделий, в частности мы можем характеризовать изучаемый псалий как изготовленный из оловянистой бронзы, что позволяет нам проводить параллели с другими подобными артефактами и, анализируя их составы и морфологию, конкретнее определять, как культурный и технологический аспект изучаемой эпохи, так и пути поставок металлического сырья. Результаты элементного анализа металла браслета демонстрируют высокое содержание меди (> 90 Wt%) и практически полное отсутствие цинка, что позволяет высказать в данной работе предположение о происхождении использованного металлического сырья.

Работа выполнена в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между НИЦ «Курчатовский институт» и Крымским федеральным университетом им. В. И. Вернадского от 11.06.2015 г.

1. Материалы совещания-семинара «Естественнонаучные методы в гуманитарных науках», Москва, 13 марта 2015 г. // НИЦ «Курчатовский институт». – М., 2015.

2. Synchrotron radiation and neutrons in art and archaeology Conference // 9-12 Sept. 2014 Musée du Louvre, Paris. (http://ipanema.cnrs.fr/spip/IMG/pdf/SR2A-2014-Book_Livre.pdf)

Нейтронороды реактора ПИК

П. И. Коник^{1, 2}, К. А. Павлов^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}, Е. В. Москвин^{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 Петербургском институте ядерной физики завершается строительство высокопоточного реактора ПИК, предназначенного для широкого спектра нейтронных исследований на выведенных пучках. На двух горизонтальных каналах будут размещены нейтронородные системы, предназначенные для доставки нейтронов в отдельный экспериментальный зал.

Современный нейтронород является неотъемлемым элементом любого нейтронного инструмента. Нейтронная оптика позволяет управлять всеми основными свойствами пучка: его сечением, расходимостью, спектром. Использование баллистических, эллиптических нейтронородов, сложных фокусирующих оптических устройств позволяет существенно повысить светосилу приборов, что чрезвычайно важно для нейтронных экспериментов.

В докладе будут представлены результаты оптимизации двух нейтронородов для приборов первой очереди реактора ПИК.

Техника формирования и переноса тонких проводящих пленок

*Н. Б. Макарова, А. С. Чумаков, А. J. K. Al-Alwani, А. С. Колесникова,
Р. А. Сафонов, Е. Г. Глуховской*

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Получение тонких металлических плёнок является актуальной задачей. Особенно, когда требуется нанесение тонких проводящих слоев на поверхности органических веществ или биологических объектов. В этом случае важно, чтобы формирующаяся пленка проявляла свою собственную механическую жесткость, не повреждала слой, лежащий ниже, и не наследовала бы его дефекты.

Получить такие пленки с требуемыми свойствами позволяет технология, в которой используются жертвенные слои, поверх которых формируются металлические проводящие пленки, переносимые на исследуемые объекты.

В настоящей работе представлены новые экспериментальные данные, демонстрирующие развитие технологических приемов работы с тонкими металлическими пленками. Было установлено, что для получения металлических пленок методом магнетронного напыления необходимо, чтобы мишени – катоды распылительной системы, – удовлетворяли следующим требованиям.

1. Они должны быть предпочтительно однокомпонентными: в случае многокомпонентности мишени, поверхность полученной металлической пленки имеет не однородную, сетчатую структуру, при переносе на поверхность воды металлическая пленка рассыпается на отдельные составляющие.

2. Предпочтительно использование металла с невысокими значениями модуля упругости: модуля Юнга (до 15×10^{10} Па), что обусловлено наличием напряжений в тонких пленках, после отделения от основы в результате стравливания жертвенного слоя.

В работе рассмотрен и протестирован ряд веществ для создания водорастворимых жертвенных слоев: мыло, додецилсульфат натрия, крахмал, сахароза. Наиболее удачными веществами оказались мыло, додецилсульфат натрия и сахароза. Кроме того, были отобраны вещества, которые так же могут успешно быть использованы для создания жертвенного слоя: декстран, амфотерный сополимер, поли-(диаллиламин малеиновой кислоты) (PDAMA).

Исследование нанослоев Со методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии

В. А. Матвеев, Н. К. Плешанов

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

Отражающие покрытия нейтронной оптики широко используются для создания нейтронно-оптических поляризаторов, анализаторов и поляризующих монокроматоров. Поляризующая эффективность является одним из главных параметров, характеризующих такие покрытия. Авторами работ [1–3] было установлено, что немагнитные области на межслойных границах и окисный слой на поверхности являются основными факторами, снижающими поляризующую эффективность покрытий на основе многослойных структур CoFe/TiZr. Эти несовершенства структуры приводят к усилению отражения нейтронов с нежелательным направлением спина. В работе [4] был предложен новый метод улучшения поляризующих нейтронных покрытий, путем добавления в структуру покрытия «антиотражающих» слоев определенной толщины с отрицательным нейтронно-оптическим потенциалом. Одним из наиболее перспективных материалов для создания таких «антиотражающих» слоев является кобальт.

В работе представлены результаты исследований нанослоев Со толщиной от 5 до 60 нм, получаемых путем магнетронного напыления. Главной задачей исследования являлось изучение устойчивости тонких пленок Со к окислению. Для этого образцы подвергались длительному окислению при комнатных температурах и отжигу в атмосфере воздуха при температуре $T = 200$ °С. Полученные результаты свидетельствуют о том, что нанослои Со достаточно устойчивы к окислению на воздухе. На поверхности всех образцов при комнатных температурах формируется слой оксида толщиной от 2,0 до 3,4 нм. При этом, даже у самых тонких нанослоев Со сохраняется слой не окисленного металла толщина которого не изменяется в течение длительного времени. Отжиг пленок приводил к заметному увеличению толщины оксидного слоя, однако даже после 2-х часового отжига слой не окисленного металла сохраняется для пленок Со толщиной 10 нм и более. Высокая устойчивость нанослоев Со к окислению открывает важную перспективу их использования в суперполяризующих покрытиях и в инновационной спин-манипуляционной нейтронной оптике.

1. C. Sella, M. Kaabouchi, et al., J. Surf. Sci. 781, 60/61 (1992).
2. J.F. Ankner, C.F. Majkrzak., J. Appl. Physic. 6436, 73 (1993).
3. N.K. Pleshanov, et al., Physica B, 397 (2007).
4. N.K. Pleshanov. Nucl. Instr. Methods A, 613 (2010).

Оптимизация работы ультрамалоуглового дифрактометра DCD на реакторе ПИК с помощью диаграмм ДюМонда

А. В. Мокану^{1, 2}, П. И. Коник^{1, 2}, Е. В. Москвин^{1, 2}

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

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

Дифрактометр DCD был передан в рамках соглашения между ПИЯФ (Гатчина, Россия) и HZG (Гестхахт, Германия) российской стороне, для размещения на строящемся высокопоточном реакторе ПИК. Поскольку условия эксплуатации дифрактометра изменяются значительно, необходимо провести оптимизацию его параметров.

Дифрактометр DCD покрывает диапазон по переданному импульсу $10^{-5} < Q < 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$, дополняя стандартный диапазон малоугловых (SANS) дифрактометров в сторону меньших значений Q . Спектр исследований на данном диапазоне широк. Достоинствами таких дифрактометров является высокое разрешение. Недостатками данной методики являются относительно низкая интенсивность на образце и высокий фон. Для снижения фона тепловых нейтронов диффузного рассеяния используется премонохроматор. Оптимизация которого, является основной задачей такой работы. Варьируя параметры и форму премонохроматора [1], можно увеличить поток нейтронов на образце и выходящую интенсивность.

Диаграммы ДюМонда впервые были описаны в работе [2]. Предназначены они были для графического анализа отражения рентгеновских лучей от больше, чем двух кристаллических поверхностей. В данной работе мы используем такие диаграммы для нейтронных лучей и многократное их преломление на совершенных кристаллах кремния. Это поможет подобрать оптимальные параметры для премонохроматора в данном инструменте.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (ФЦП, проект №RFMEFI61614X0004)

1. A.K. Freund, C. Rehm. Phase space optimisation of the USANS instrument Kookaburra at the ANSTO OPAL reactor. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 634 (2011) S81–S89.

2. JWM DuMond. Theory of the use of more than two successive x-ray crystal reflections to obtain increased resolving power. Physical Review (1937).

Индукцированная внешним электрическим полем неоднородная деформация и ее релаксация в монокристалле SrTiO₃

Е. Д. Обозова, В. Г. Залесский

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Взаимосвязь градиента деформации и поляризации диэлектрического кристалла носит название флексоэлектрического эффекта (ФЭ) [1]. По аналогии с обратным пьезоэффектом отклик неоднородной деформации на поляризацию внешним электрическим полем назван обратным ФЭ (ОФЭ).

Настоящая работа посвящена установлению неоднородной деформации интерференционным методом и изучению релаксационных процессов при ОФЭ. Исследования проводились на SrTiO₃, поскольку он является неполярным кристаллом, что сводит к минимуму влияние пьезоэффекта. Были использованы монокристаллические пластины оптического качества, площадью поверхности 130 mm² и толщиной 143 μm. На поверхность образца наносились серебряные электроды, которые также служили зеркалами. Неоднородная деформация индуцировалась периодическими импульсами напряжения треугольной формы до ±750 V ($E = \pm 55$ kV/cm). Для наблюдения деформации использовался интерференционный микроскоп, который позволил оценивать величину смещения (прогиба) зеркальной поверхности с точностью до 10 nm.

В результате установлена деформация сферического изгиба, при этом максимальный прогиб пластин достигал 0.20 μm. Получена зависимость неоднородной деформации от поля в виде петель гистерезиса. Причиной гистерезиса является релаксация деформации. Обнаружено, что время установки деформации изгиба составляет величину $\tau = 72\text{--}100$ s, а время ее релаксации $\tau = 3\text{--}6$ s. Времена релаксации соизмеримы с RC образца.

Полученные данные свидетельствуют о существенном вкладе объемного заряда в ОФЭ в SrTiO₃.

1. P. Zubko, G. Catalan, and A. Tagantsev, Flexoelectric Effect in Solids, Annual Review of Materials Research, 43, 387-421 (2013).
2. В. Г. Залесский, Е. Д. Румянцева, Обратный флексоэлектрический эффект в монокристалле SrTiO₃, Физика Твёрдого Тела, 56, 1301-1303 (2014).

Оптимизация поляризатора на пропускание для установки малоуглового рассеяния нейтронов

К. А. Павлов^{1, 2}, П. И. Коник^{1, 2}, Е. В. Москвин^{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*

Создание поляризатора для установки малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) представляет собой нетривиальную задачу. Инструменты МУРН работают как в поляризованном, так и в неполяризованном режиме, используют нейтронный пучок большого сечения, широкий диапазон длин волн падающих нейтронов и имеют большие габариты. Эти особенности ставят высокие требования к поляризующему устройству. Поляризатор должен создавать высокую (от 95 %, в зависимости от научных задач конкретной установки МУРН) поляризацию пучка в широком диапазоне длин волн при максимально возможном пропускании, а также обеспечивать смену режима работы установки с поляризованного на неполяризованный, не изменяя направления оси пучка. По этой причине оптические поляризаторы, работающие на отражение, в данном случае не применимы, и для установки МУРН требуется поляризатор, работающий на пропускание.

В данной работе был рассмотрен ряд возможных приемлемых поляризующих устройств, реализованных на суперзеркальных покрытиях: бендер на прохождение, S-образный бендер и клиновидный (V-cavity) [1] поляризатор. Моделирование работы устройств и оптимизация их характеристик проведена в программном пакете McStas, реализующем численное моделирование методом Монте-Карло для нейтронного рассеяния [2]. В моделях отражающих элементов использованы параметры, соответствующие реальным многослойным покрытиям, технология производства которых в настоящий момент доступна в ПИЯФ НИЦ КИ.

Показано, что бендер не является наилучшим вариантом поляризатора для малоуглового дифрактометра вследствие сравнительно невысокого (около 70 %) геометрического пропускания. Для клиновидного поляризатора были рассчитаны параметры, обеспечивающие требуемый режим работы на примере малоуглового дифрактометра SANS-2, который в настоящий момент оптимизируется для работы на реакторе ПИК в ПИЯФ НИЦ КИ: поляризация от 95 % на всём рабочем диапазоне длин волн от 4 до 25 Å. Показано, что клиновидный поляризатор имеет максимально возможное (от 98 %) пропускание при заданной поляризации и, как следствие, является оптимальным вариантом для установки МУРН.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (ФЦП, проект №RFMEFI61614X0004).

1. T. Krist, C. Lartigue, F. Mezei, Physica B 1005-1006, 180&181 (1992).

2. K. Lefmann, K. Nielsen, Neutron News 20-23, 10 (1999).

Принцип построения и оптимизация времяпролетного спектрометра нейтронов

А. О. Петрова², П. И. Коник^{1, 2}, Е. В. Москвин^{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 в Петербургском институте ядерной физики (ПИЯФ НИЦ КИ) завершается строительство высокопоточного реактора ПИК. На выведенных пучках планируется обустройство большого числа нейтронных станций для исследований в области нейтронного рассеяния. Одним из таких приборов должен стать многодисковый времяпролетный спектрометр, предназначенный для экспериментов в области квазиупругого рассеяния нейтронов.

Важнейшей частью такого прибора является каскад прерывателей, обеспечивающих различные функции: создание нейтронного импульса, монохроматизация пучка, фильтрация высших порядков и предотвращение рецикличности.

Данная работа носит обзорный характер и содержит в себе описание принципа построения и оптимизации времяпролетного спектрометра. Главным образом рассматривается основная пара прерывателей, а именно создающего нейтронные импульсы и монохроматизирующего. Демонстрируются формулы для разрешения и интенсивности на образце для различных конфигураций прерывателей и нейтронновода между ними. В завершение даны общие рекомендации, касающиеся времяпролетного спектрометра на реакторе ПИК.

Адаптивная система измерения амплитуды и частоты квазигармонических сигналов

К. А. Пшеничный

Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

Большинство современных методов оценивания частоты квазигармонических сигналов требуют достаточно большой выборки сигнала и не могут использоваться в системах реального времени. В работе [1] предложен оперативный параметрический метод оценивания частоты, который позволяет обновлять оценку частоты с получением каждого нового отсчета сигнала, используя всего 12 арифметических операций. Для достижения максимальной точности работы этого метода необходимо использовать параметр прореживания Q , который выбирается так, чтобы частота сигнала составляла $f \approx f_d/(4Q)$. Если частота сигнала f изменяется сильно, но медленно, а частота дискретизации $f_d \gg f$, по мере изменения частоты можно изменять и Q . На рисунке 1 изображена структурная схема адаптивной системы для измерения частоты и амплитуды таких сигналов.

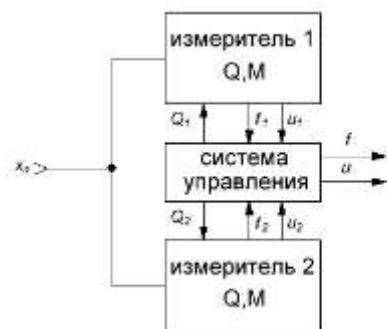


Рис. 1. Структурная схема адаптивной системы для измерения частоты и амплитуды

Она состоит из двух измерителей частоты и амплитуды, использующих параметрический метод [1], и системы управления, задача которой заключается в том, чтобы принимать параллельно от двух измерителей частоту и амплитуду и выводить на выход данные только одного. Система управления определяет оптимальный параметр Q и задает его другому измерителю. На следующем шаге система управления ждёт $3Q+M$ отсчётов (это необходимо для окончания переходного процесса) и подключает выход к измерителю, работающему с оптимальным параметром Q .

Далее алгоритм повторяется, а Q выбирается как целая часть отношения $f_d/(4f)$. На рисунке 2 представлены временные диаграммы работы системы на примере сигнала с линейно изменяющейся частотой.

Работа адаптивной системы проверена как с помощью численного моделирования, так и с помощью реальной системы обработки сигналов звукового диапазона.

1. Andrey V Nikitin, Kirill A Pshenichnyy and Sergey V Yushanov. "A method for fast estimation of slowly changing parameters of a quasi-harmonic signal." Measurement Science and Technology. Published 4 January 2016.

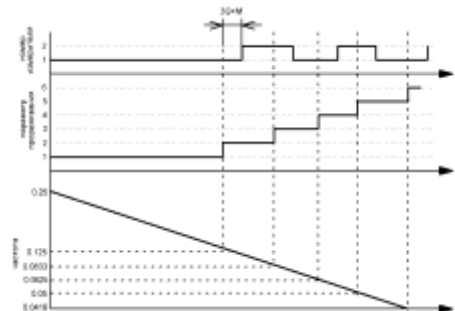


Рис. 2. Временные диаграммы работы адаптивной системы

Анализ адсорбции молекул СО на поверхности нанокластеров палладия: DFT-подход и FTIR-исследования

Ю. В. Русалёв, А. А. Гуда, А. П. Будник

*Международный исследовательский центр «Интеллектуальные материалы»,
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

Палладий является одним из лучших катализаторов для оксидации СО. Протекание данной реакции очень важно для уменьшения промышленных и автомобильных выхлопов, помимо этого оксидация СО является отличной моделью для фундаментальных исследований катализаторов на базе переходных металлов. В связи с чем, исследования в этой области являются весьма актуальным. В данном случае важно знать, как меняется активность палладия по отношению к СО с изменением размеров и формы кластера [1]. Для решения данной задачи мы использовали DFT расчёты и ИК-Фурье спектроскопию.

В ходе работы мы построили различные модели кластеров палладия, наиболее совпадающие по форме и размеру с некоторыми синтезированными образцами, а также была произведена их геометрическая оптимизация. На 14-атомный кластер палладия были посажены молекулы СО в разном количестве на разные позиции. После оптимизации таких структур был произведён расчёт ИК спектров в программных оболочках ADF-2014 и VASP 5.2.

В конечном итоге были получены частоты колебаний молекул СО на различных поверхностях нанокластеров палладия и проведено их сравнение для разных позиций посадки СО. Помимо этого, была разработана схема экспериментальной установки смешивания газов для DRIFT спектроскопии [2].

1. Janos Szanyi, W. Kevin Kuhn, and D. Wayne Goodman J. Phys. Chem. 1994, 98, 2978-2981.

2. Griffiths, P. R.; Haseth, J. A. d. Fourier Transform Infrared Spectrometry, 2nd ed.; John Wiley & Sons: New York, 2007.

Фазовые переходы в твердых растворах на основе церата бария

Е. М. Филоненко, Ю. А. Лутицкая, Д. А. Калганов

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Среди известных в настоящее время высокотемпературных протонных твердых электролитов материалы на основе церата бария BaCeO_3 относятся к наиболее высокопроводящим и продолжают активно изучаться [1]. Согласно [2], соединение BaCeO_3 испытывает ряд фазовых превращений в интервале 300–1300 К, связанных с изменением симметрии кристаллической решетки. Однако имеющиеся в литературе данные о фазовых переходах для BaCeO_3 крайне противоречивы, а влияние степени замещения ионов металлов с другой валентностью (допантов) на структуру и фазовые переходы практически не изучено.

В связи с этим целью работы явилось получение новой информации о влиянии легирующих добавок на истинную температуру фазовых переходов в системе $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($\text{Me}^{3+} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}$) и условиях образования равновесных продуктов реакции при конкретных изотермических выдержках, соответствующих граничным точкам (T_{\min} и T_{\max}) экзо- и эндоэффектов. Полученные сведения представляют несомненную ценность при изучении ионной проводимости ТООЭ и их практического применения, для работы электрохимических устройств.

Изучение фазовых переходов в твердых растворах церата бария осуществляли методами дериватографии с использованием термовесовой установки дериватограф Q-1000 Paulic–Erdey. После каждой изотермической выдержки образцов проводили качественный рентгенофазовый анализ на дифрактометре ДРОН-3 ($\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучение).

По данным дифференциально-термического анализа для фаз состава $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$ определены истинные температуры фазовых превращений и установлено, что в интервале температур 300–1223 К наблюдается ряд фазовых превращений первого и второго рода, ранее не описанных в литературе.

Кроме того, в докладе обсуждается вопрос о влиянии природы допанта на температуры фазовых переходов в системе $\text{BaCe}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($\text{Me}^{3+} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}$).

1. T. Norby, J Chem. Eng. Jpn. 40(13), (2007).
2. K. Knight, Solid State Ionics. 74(3), (1994).

Компьютерное моделирование роста тонких пленок

Н. В. Цвигун, И. В. Кожевников

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

Для многих практических применений требуется напыление тонких пленок с минимальной шероховатостью. Со временем на поверхности пленки практически всегда образуется адгезионный слой. Он нарастает до некоторой величины, а затем его увеличение прекращается. В работе представлено развитие одного из методов [1, 2] компьютерного моделирования роста тонких пленок. Это исследование проведено с целью углубления понимания законов формирования адгезионного слоя на поверхности пленки.

На начальной стадии формирования пленки был взят одномерный массив длины $L = N \cdot d$, где N – количество кубических частиц («молекул»), d – их линейный размер. Затем добавлен поток таких же частиц. Их количество намного больше длины массива. Этот поток случайным образом с равномерным распределением вероятности осаждается на поверхность массива несколькими способами [3]. Была учтена вероятность того, что частица вообще не останется на поверхности. В процессе оседания частиц на поверхность моделируемой пленки регулярно рассчитываем шероховатость и спектральную плотность мощности высот шероховатости полученной структуры. Далее анализируем изменения шероховатости в зависимости от времени напыления.

Отмечено, что на начальной стадии роста шероховатость пленки возрастает, а с некоторого момента она достигает величины насыщения. Эта величина практически во всех исследованных модельных случаях зависит от длины массива как $L^{0.5}$. Полученные результаты хорошо описываются скейлинговой теорией [1, 2], что позволяет продолжить исследования в данном направлении.

1. Family F., Viscek T. *Jornal of Physics A*, 18, 75 (1985).
2. Family F. *Jornal of Physics A*, 19, 441 (1986).
3. Barabasi A-L., Stanley H.E. Cambridge University Press, *Fractal Consepts in Surface Growth* (1995).

**Самоподдерживающиеся механореакционные фронты.
Основные принципы пространственной организации
твердофазных химических реакций, сопровождающихся разрушением**

С. А. Чижик, А. А. Сидельников, А. А. Матвиенко

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

Углубленное понимание механизмов твердофазных химических превращений требует обязательного привлечения полноценного макрокинетического рассмотрения, учитывающего связанное протекание химических реакций, процессов переноса и фазообразования в твердых реагентах. Особенность макрокинетики твердофазных реакций состоит в одновременном протекании различных физических процессов, оказывающих значительное влияние на скорость и пространственное развитие превращений – явление, известное как обратная связь. Такая обратная связь имеет нелинейный характер, а неравновесные процессы с нелинейными обратными связями известны способностью к пространственной и временной самоорганизации, достаточно вспомнить о реакции Белоусова-Жаботинского, ячейках Бенара и фронтах в реакциях горения.

Наиболее типичным видом обратной связи в твердофазных превращениях является связь между реакцией и вызываемыми ею механическими процессами. Химические превращения, как правило, приводят к существенным изменениям объема или структуры веществ, что вызывает значительные механические напряжения в реакционных зонах и запускает процессы пластической деформации и разрушения. Механические процессы оказывают влияние на массоперенос и химические стадии посредством изменения энергетики элементарных стадий и морфологии веществ. Такое взаимовлияние приводит к пространственной самоорганизации всех составляющих процессов, к формированию реакционных фронтов, имеющих характер устойчивых диссипативных структур. Для гетерогенных превращений типа термического разложения характерно образование совместных фронтов реакции и разрушения – самоподдерживающихся механореакционных фронтов. В зависимости от ряда физико-химических характеристик реагентов, формирование таких фронтов сопровождается различными эффектами пространственной самоорганизации, включающими упорядоченные сетки трещин, структурированную поверхность фронта, морфологическую и кристаллографическую упорядоченность продуктов превращения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-03-00902.

Компьютерное моделирование процесса синтеза графена на монослое Ленгмюра

*А. С. Чумаков, А. С. Колесникова, Н. Б. Макарова,
А. J. K. Al-Alwani, P. A. Сафонов, Е. Г. Глуховской*

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Синтез монослоев (МС) графена – является актуальной и нетривиальной задачей. В настоящее время для решения этой задачи существуют два подхода: сверху-вниз (расщепление массивного образца на отдельные слои) и снизу-вверх (синтез МС графена на границах раздела фаз из атомарного углерода или нанографенов) [1–3].

Использование границ раздела газ-жидкость для формирования МС поверхностно-активных веществ известно давно: примером может служить метод Ленгмюра-Блоджетт [4]. Но с помощью таких границ можно упорядочивать не только амфифильные вещества, но и нерастворимые в воде молекулы полициклической ароматики (нафталина, пирена, коронена).

В настоящей работе методом компьютерного моделирования исследована возможность формирования МС графена на границе раздела фаз, представлены результаты поиска оптимальных условий необходимых для формирования МС графена на МС арахидиновой кислоты, сформированной на поверхности воды.

Исследования осуществлялись методом молекулярной динамики с использованием потенциала AMBER. Объектом исследования являлись молекулы нафталина и арахидиновой кислоты, сформированной на водной субфазе.

Исследовалось поведение молекул нафталина на поверхности молекул арахидиновой кислоты с упорядоченной и с неупорядоченной структурой. Это позволило уточнить структурную форму арахидиновой кислоты, которая способствовала удержанию на своей поверхности молекул нафталина.

Было показано, что при уменьшении площади, занимаемой монослоем арахидиновой кислоты, ее молекулы формируют упорядоченную структуру: алифатические цепи ориентированы в одну сторону, а полярные головы – в противоположную.

После формирования плотноупакованного МС арахидиновой кислоты на ее поверхность размещались молекулы нафталина и исследовалась возможность протекания реакции между двумя соседними молекулами в различных условиях.

1. B. Jayasena, S. Subbiah, *Nanoscale Res. Lett.* 95 7 (2011).
2. W. Yang, G. Chen, et. al., *Nature Materials* 12, 792 (2013).
3. S. Niyogi, E. Bekyarova, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 128, 24, 7720 (2006).
4. J.J. Giner-Casares, G. Brezesinski, et al., *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 19 (3), 176 (2014).
5. M.M. Jaafar, G.P.M.K. Ciniciato, et al. *Langmuir*, 31, 38, 10426 (2015).

Приближение непрерывной плотности для расчета парциальных координационных чисел в биметаллических наночастицах

Д. Б. Шемет, В. В. Прядченко, В. В. Срабионян, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Одним из наиболее эффективных и широко применяемых методов структурного анализа наночастиц малого размера (< 10 нм), является рентгеновская спектроскопия поглощения в протяженной энергетической области над краем поглощения атома или EXAFS спектроскопия, позволяющая получать информацию о ближнем окружении атома в соединении в отсутствие дальнего порядка [1, 2]. Метод EXAFS широко применяется к изучению биметаллических наночастиц [3, 4]. Однако, поскольку получаемые из EXAFS величины параметров структуры ближнего окружения атомов позволяют делать лишь косвенные заключения об атомном строении изучаемых двухкомпонентных материалов, для получения наглядного представления о характере распределения компонентов по всему объему наночастицы, отвечающему полученным из EXAFS значениям структурных параметров, разрабатываются и применяются методики кластерного моделирования [5]. Как правило, для построения кластерных моделей биметаллических наночастиц атомные кластеры с размерами, соответствующими наблюдаемым размерам наночастиц, получают путем «вырезания» их из соответствующей периодической кристаллической решетки, с последующим заполнением узлов в соответствии с определенными алгоритмами так, чтобы вычисляемые для такого кластера парциальные координационные числа отвечали определяемым из EXAFS [4].

В настоящей работе предложен подход, позволяющий определять характер радиального распределения компонентов в биметаллической наночастице (от однородного твердого раствора до “core-shell” наночастиц), без построения атомных кластеров, основанный на аналитическом вычислении парциальных координационных чисел по заданной функции радиального распределения компонентов в наночастице определенного размера в приближении непрерывной плотности. Выполнено сравнение результатов применения такого подхода к определению характера распределения атомов в наночастицах PtAg и PtCu с результатами, полученными методами прямого кластерного моделирования.

1. V. V. Sraibionyan, A. L. Bugaev et al. J. Phys. Chem. Sol. 75, 4 (2014).
2. V. V. Sraibionyan, A. L. Bugaev et al. J. Non. Cryst. Sol. 382 (2013).
3. K. Maeda, R. Abe, K. Domen, J. Phys. Chem. C. 115 (2011).
4. V. V. Pryadchenko, V. V. Sraibionyan et al. J. Phys. Chem. C. 119 (2015).
5. A. I. Frenkel, A. Yevick et al., Annu. Rev. Anal. Chem. 4 (2011).

Список участников

ФИО	Организация	E-mail	стр.
Aliyev Yusif Imrayiloglu	НАН Азербайджана, ИРПРО	yusifafshar@gmail.com	77
Boehm Martin	ILL	boehm@ill.fr	
Falus Péter	ILL	falus@ill.eu	
Gukasov Arsen	LLB CEA-CNRS	arsen.goukassov@cea.fr	7
Honecker Dirk	ILL	honecker@ill.eu	
Huseynova Vusale Kamalkizi	ПСШ № 324, Баку	yusifasadov@rambler.ru	
Koza Michael Marek	ILL	koza@ill.fr	
Lorman Vladimir	Université de Montpellier	vladimir.lorman@univ-montp2.fr	9
Rogalev Andrei	ESRF	rogalev@esrf.fr	12
Smekhova Alevtina	FZ Juelich (PGI-6)	smeal@physics.msu.ru	17
Shugai Anna Andreevna	KBFI	anna110385@gmail.com	150
Абакумов Артем Михайлович	Сколтех	a.abakumov@skoltech.ru	4
Абасзаде Рашад Габил	НАН Азербайджана	Abaszade@rambler.ru	164
Абиев Афсун Сахават оглы	БГУ	afsunabiyev@gmail.com	
Абубакаров Абу Геланиевич	ЮФУ	abubakarov12@mail.ru	165
Авраменко Марина Владиславовна	ЮФУ	avramenko.marina@gmail.com	166
Адельсон Вероника Яковлевна	СПбГУ	adelson_v@outlook.com	75
Азарова Любовь Александровна	СПбГУ	loveazarova@gmail.com	209
Аксенов Виктор Лазаревич	ПИЯФ НИЦ КИ	dir@pnpi.spb.ru	
Актерский Андрей Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	aktersky@gmail.com	
Александров Евгений Викторович	СГАУ	aleksandrov_ev1@mail.ru	
Алексеева Ольга Александровна	СПбПУ	blackhole2010@yandex.ru	18
Алешова Назгуль Ерлановна	ЕНУ	nazgyl-91@mail.ru	76
Алигулиева Хаяла Вагиф	НАН Азербайджана, ИФТТ РАН	xayala-firuza@mail.ru	167

Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@lns.pnpi.spb.ru	19
Амарантов Сергей Владимирович	ИК РАН	amarantov_s@mail.ru	152
Амиров Абдулкарим Абдулнатилович	ИФ ДНЦ РАН	amiroff_a@mail.ru	79
Андроникова Дарья Александровна	ФТИ РАН	andronikova.daria@gmail.com	55
Антонов Николай Евгеньевич	СПБПУ	zergiummail@mail.ru	
Антонова Елена Владимировна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	antonnelena@gmail.com	
Арефьев Михаил Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	arefievm@mail.ru	56
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dmitri.aristov@gmail.com	
Артикульный Александр Петрович	ОИЯИ	Artikulnyy@ukr.net	20
Афонин Сергей Сергеевич	СПбГУ	afonin24@mail.ru	168
Бажажин Алексей Геннадьевич	ОИЯИ	bajajin@jinr.ru	21, 22, 210, 211
Безносиков Дмитрий Степанович	СГУ им. П. Сорокина	uvn71p3@gmail.com	
Белов Павел Александрович	ИТМО	belov@phoi.ifmo.ru	5
Белогорлов Антон Анатольевич	НИЯУ МИФИ	AABelogorlov@mephi.ru	
Бельтюков Артемий Николаевич	ФТИ УрО РАН	beltukov.a.n@gmail.com	212
Бериков Данияр Бериккулы	ОИЯИ	daniyar.berikov@gmail.com	
Бернардо-Сапрыкин Валерий Хосеевич	ВолГУ	bernardo- saprykin@yandex.ru	
Блатов Алексей Александрович	НМУ	al-blatov@yandex.ru	169
Бобриков Иван Анатольевич	ОИЯИ	bobrikov@nf.jinr.ru	23
Бойцова Ольга	ИОНХ РАН	boytsova@gmail.com	80, 81
Болдырев Кирилл Николаевич	ИСАН РАН	kn.boldyrev@gmail.com	82, 83
Бондарев Алексей Владимирович	ВГТУ	bondarev@vmail.ru	170
Боржова Кристина Ивановна	ПетГУ	Borzhova_Kristina@mail.ru	84
Боркунов Родион Юрьевич	БФУ	rborkunov@mail.ru	

Бородулин Ярослав Владимирович	СГМУ	borodulinyv@mail.ru	153
Бортникова Светлана Алексеевна	НИЯУ МИФИ	svetlana.sweta7@yandex.ru	85
Бочаров Дмитрий	ИФТТ Латвийского университета	bocharov@latnet.lv	213, 214
Бронвальд Юрий Алексеевич	ФТИ РАН	yuramel@gmail.com	57
Бугров Александр Николаевич	ИВС РАН	alexander.n.bugrov @gmail.com	
Булаева Елена Александровна	ЧелГУ	lupitskaya@rambler.ru	86
Булат Наталья Витальевна	ЮФУ	natty.bu@yandex.ru	215
Быков Алексей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	redi87@bk.ru	24
Быков Виктор Анатольевич	ИМЕТ УрО РАН	wildrobert@gmail.com	87
Быков Эдуард Олегович	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	mcgector@yandex.ru	25
Валеев Ришат Галеевич	ФТИ УрО РАН	rishatvaleev@mail.ru	58, 88
Валиярова Аделя Ринатовна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	adel_chik92@mail.ru	216
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	59
Ванина Полина Юрьевна	СПбПУ	p.yu.vanina@gmail.com	
Вартаньянц Иван Анатольевич	DESY	ivan.vartaniants@desy.de	6
Васильев Андрей Иванович	ПетрГУ	aivasilev92@mail.ru	89
Васин Михаил Геннадьевич	ФТИ УрО РАН	dr_vasin@mail.ru	171, 172
Воронков Роман Анатольевич	НИЯУ МИФИ	kesius@yandex.ru	
Вохмянина Кристина Анатольевна	БелГУ	vokhmyanina@bsu.edu.ru	217
Ву Ван Туан	ДГТУ	tvu@dstu.edu.ru	173, 174
Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	gavrilov@pnpi.spb.ru	
Гайсин Айдар Уралович	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	darikgais@gmail.com	218
Галимзянов Руслан Равильевич	НИТУ МИСиС	gal_ruslan@yahoo.com	219
Гапон Игорь Васильевич	ОИЯИ	gapon@jinr.ru	26
Гартвик Андрей Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gartwik@lns.pnpi.spb.ru	
Гасанов Турал Полад	НИЯЦ	hasanovtural@mail.ru	

Гасанова Самира Имамгулу	АзТУ	samira-joje@mail.ru	
Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gerashch@pnpi.spb.ru	
Гинзбург Саул Лейбович	ПИЯФ НИЦ КИ	ginzbsl@mail.ru	
Глебова Ирина Борисовна	ИХС РАН	iraglebova@mail.ru	90, 91
Глушко Илья Андреевич	ЧелГУ	iaglushko@mail.ru	
Голушко Иван Юрьевич	ЮФУ	vaniagolushko@yandex.ru	154
Гончарова Анна Сергеевна	МГУ	goncharoAS@gmail.com	92
Горбань Иван Евгеньевич	МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	Gorivan96@gmail.com	
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@pnpi.spb.ru	
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Григорькин Алексей Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ale-grig@yandex.ru	175
Гришина Анастасия Евгеньевна	СПбГУ	grinassia@mail.ru	93
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	94
Гумбатов Ширхан Арастун	БГУ	shirxan-humbatov@mail.ru	95
Гурьева Полина Викторовна	НИЦ КИ	poli.b3@gmail.com	60
Гусейнов Гусейн Джалиль	НАН Азербайджана	huseyn-1978@mail.ru	220
Данилов Игорь Владимирович	ИФВД РАН	idanilov@hppi.troitsk.ru	96
Дарьин Федор Андреевич	ИЯФ СО РАН	fdaryin@gmail.com	61
Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	176
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	
Добрецова Елена Анатольевна	ИСАН РАН	elena-dobrecova@yandex.ru	
Довженко Глеб Денисович	ПИЯФ НИЦ КИ	dovjenko.g@gmail.com	
Дорошкевич Александр Сергеевич	ОИЯИ	doroh@jinr.ru	221
Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	32167i@mail.ru	222

Дубовский Игнат Максимович	ПИЯФ НИЦ КИ	qwor50@gmail.com	
Дудник Майя Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	mayyag.dudnik@gmail.com	177
Дядькин Вадим Александрович	ESRF	diadkin@esrf.fr	15, 16
Егоров Евгений Николаевич	СГУ	vermin.zebra@gmail.com	
Егорова Татьяна Леонидовна	ИХС РАН	egorova.offver@gmail.com	97
Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ ФНМ	eliseev@inorg.chem.msu.ru	
Елисеев Артем Анатольевич	МГУ	artem.a.eliseev@gmail.com	98
Ельникова Лилия Вячеславовна	ГНЦ РФ ИТЭФ НИЦ КИ	elnikova@itep.ru	178
Еремин Роман Александрович	МНИЦТМ СамГУ	eremin_roman@inbox.ru	
Ереско Сергей Олегович	НовГУ	erescko.sergei@yandex.ru	
Ермолович Антон Олегович	БГУИР	anton.yermalovich@gmail.com	223
Ёров Хурсанд Эльмуродович	МГУ	khursandy@gmail.com	99
Жилеева Эльвира Александровна	ЮФУ	wonderfullife.bluesky@mail.ru	179
Жилова Ольга Владимировна	ВГТУ	zhilova105@mail.ru	100
Жогин Иван Львович	НПП «Буревестник»	zhogin_il@bourestnik.spb.ru	180, 224
Жукова Елена Михайловна	МарГУ	Zhukovaelena88@mail.ru	
Жумаев Мустахим Рафиевич	БухИТИ	mrjumaev2011@mail.ru	181
Завьялова Анастасия Юрьевна	СПБГЭТУ (ЛЭТИ)	zavialova.a.y@gmail.com	101
Зайцева Анастасия Ивановна	ПИЯФ НИЦ КИ	zaytseva@lnsp.pnpi.spb.ru	
Закиева Ильхама Гашир	ИФ НАН Азербайджана	ilxama@inbox.ru	
Звягинцев Олег Анатольевич	СПБГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	kudriashkin@inbox.ru	62
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	zobkalo@pnpi.spb.ru	
Ибрагимова Милана Абасовна	ЕНУ	i.m.13@bk.ru	102
Иванова Наталья Анатольевна	НИЯУ МИФИ	uran-o2@yandex.ru	225

Ивашевская Светлана Николаевна	ИГ КарНЦ РАН	ivashevskaja@yahoo.com	103
Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН	ivitcheva@mail.ru	104
Ипатов Дмитрий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	starkylove@yandex.ru	
Исакова Наталья Николаевна	НИЦ КИ	nnisakova@mail.ru	226
Казаков Евгений Алексеевич	ЮФУ	Sechevik@gmail.com	227
Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	105, 155
Канюков Егор Юрьевич	НАН Беларуси по материаловедению	ka.egpor@mail.ru	106
Каплий Анна Андреевна	БелГУ	ann.kapliy@mail.ru	228
Капустин Дмитрий Игоревич	ИФТТ РАН	d.i.kapustin@mail.ru	229
Карпов Иван Дмитриевич	НИЦ КИ	idkarpov@ya.ru	230
Картапова Татьяна Сергеевна	ФТИ УрО РАН	radostinka301@yandex.ru	107, 108
Киреенко Юрий Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	osnerde@gmail.com	
Кириленко Павел Сергеевич	НГУ	p.s.kirilenko@gmail.com	231
Киричков Михаил Викторович	МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	ihomeer@gmail.com	109
Киселев Игорь Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kisselev@omrb.pnpi.spb.ru	
Клементьев Константин Вячеславович	MAX IV Laboratory	konstantin.klementiev@ maxlab.lu.se	8
Климонт Анастасия Александровна	НИТУ «МИСиС»	nklimont@gmail.com	110
Клюева Мария	НИТУ «МИСиС»	23sh82vd@gmail.com	111
Козлов Валерий Степанович	ПИЯФ НИЦ КИ	vskozlov@pnpi.spb.ru	112
Козлова Ольга Александровна	БГУИР	olga.bsuir@gmail.com	232, 233
Козловский Артем Леонидович	ЕНУ	artem88sddt@mail.ru	113, 234
Колобылина Наталья Николаевна	НИЦ КИ	kolobylina@gmail.com	235
Колпачева Наталия Алексеевна	ЮФУ	kolpacheva.natalia@ gmail.com	63
Кондулукова Дарья Александровна	СПБПУ	dasha557755@mail.ru	

Коневцова Ольга Викторовна	ЮФУ	khelgla@yandex.ru	156
Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	236
Кононихина Виктория Витальевна	HZG	Victoriakononikhina@gmail.com	
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@lms.pnpi.spb.ru	
Коршунов Артем Николаевич	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	artem.korshunov91@gmail.com	27
Кочкина Виктория Константиновна	ЮФУ	kochkina94@list.ru	114
Кудлис Андрей	СПбГУ	andrewkudlis@gmail.com	182
Куликова Татьяна Владимировна	ИМЕТ УрО РАН	kuliko@gmail.com	
Кучугура Мария Дмитриевна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	mariya_kuchugura@mail.ru	28
Лазаренко Владимир Александрович	НИЦ КИ	vladimir.a.lazarenko@gmail.com	64
Лазебник Иосиф Моисеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	lazebnik@pnpi.spb.ru	
Леонтьев Артем Андреевич	СПбПУ	temazavr93@mail.ru	65
Леонтьев Игорь Николаевич	ЮФУ	i.leontiev@rambler.ru	
Литвиненко Глеб Витальевич	НИТУ «МИСиС»	doctor.affla2s@gmail.com	115
Лихолетова Елена Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	likholetova@lms.pnpi.spb.ru	
Лобанов Борис Владимирович	МарГУ	lbv_marsu@mail.ru	183
Лобова Анна Алексеевна	ПетрГУ	annetta_lobova@mail.ru	116
Логинов Дмитрий Владимирович	ПетГУ	logindm@mail.ru	117
Лончакова Ольга Владимировна	временно не работает	la-chita@mail.ru	
Лупицкая Юлия Александровна	ЧелГУ	lupitskaya@gmail.com	118
Львов Дмитрий Владимирович	ИТЭФ НИЦ КИ	lvov@itep.ru	29
Макаров Павел Андреевич	СГУ им. П. Сорокина	makarovpa@syktsu.ru	184
Макарова Ирина Павловна	ИК РАН	makarova@crys.ras.ru	119
Макарова Наталия Борисовна	СГУ	Makanataliya@MAIL.RU	237
Максимова Анна Владимировна	ЮФУ	anyuto4ka2006@rambler.ru	120

Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	
Матасов Макс Дмитриевич	СГУ	pooryork86@gmail.com	157
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	238
Матвеева Анна Николаевна	ПетрГУ	anyta_macarova1@mail.ru	121
Матвеева Полина Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	polina.matveyeva@gmail.com	30
Мейримова Татьяна Юрьевна	ЕНУ	tanay_91@mail.ru	122
Метлов Константин Леонидович	ДонФТИ	metlov@fti.dn.ua	10
Микаилова Амина Джумшуд	ИРП НАН Азербайджана	mikayilova.a.c@gmail.com	158
Мирлин Александр Давидович	ПИЯФ НИЦ КИ	alexander.mirlin2@kit.edu	11
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	31
Михайленко Евгений Константинович	СПБПУ	em-10@mail.ru	185
Михейкин Алексей Сергеевич	ЮФУ	aleksey.mikheykin@gmail.com	66
Мищенко Илья Никитич	ФТИАН РАН	IlyaMischenko@rambler.ru	186
Мокану Алина Васильевна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	sparda_93@mail.ru	239
Морозов Максим Сергеевич	СамГУ	maxymor@mail.ru	
Москвин Александр Сергеевич	УрФУ	alexander.moskvin@urfu.ru	
Москвин Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	mosqueen@pnpi.spb.ru	
Москвина Оксана Игоревна	ПИЯФ НИЦ КИ	muzyko@lns.pnpi.spb.ru	
Муравьев-Смирнов Сергей Сергеевич	НИЯУ МИФИ	SSMuravyevsmirnov@mephi.ru	
Муслимов Арсен Эмирбекович	ИК РАН	amuslimov@mail.ru	123
Мухаметулы Багдаулет	ОИЯИ	bagdaulet_m@mail.ru	32
Мухина Елена Дмитриевна	РГУ нефти и газа	mukhina.e@gubkin.ru	67
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru	
Набиев Асиф Араслы оглы	ОИЯИ	asifnebi@jinr.ru	
Нагорный Анатолий Васильевич	ОИЯИ	avnagorny@jinr.ru	33

Назаров Куаныш Мейргазыулы	Университет «Дубна»	quanysh@list.ru	34
Назипов Дмитрий Валерьевич	УрФУ	qwear0@gmail.com	187
Нгуен Тхи Тхам Хонг	БелГУ	ngthanhong@gmail.com	188
Неустроев Алексей Сергеевич	ЧелГУ	neustroevas@ya.ru	124
Никитин Станислав Евгеньевич	ИФ СО РАН	nikitin.stas.92@mail.ru	35
Никитина Маргарита Александровна	СПбГУ	margaritnikitina@yandex.ru	189
Николаев Сергей Николаевич	НИЦ КИ	niklser@list.ru	125
Никоноров Андрей Алексеевич	ФГКУ 12 ЦНИИ Минобороны РФ	AndreyNikonorov@yandex.ru	
Ниязов Рамиль Асхатович	ПИЯФ НИЦ КИ	ramilniyazov@gmail.com	190
Нухов Азим Кадимович	ДГУ	nukhov1984@mail.ru	191
Обозова Екатерина Дмитриевна	ФТИ РАН	oed1990@gmail.com	240
Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyanikov_a_k@mail.ru	
Окороков Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov@pnpi.spb.ru	
Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv76@mail.ru	126
Павлов Константин Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	orbitalpk@lns.pnpi.spb.ru	241
Пан Анатолий Евгеньевич	ОИЯИ	pan.1992@bk.ru	
Парр Марина Аркадьевна	СПбГУ	mparr@mail.ru	159
Петров Владислав Павлович	УрФУ	lancervlad@gmail.com	193
Петрова Анита Олеговна	СПбГУ	ani_petrova@mail.ru	242
Пилипенко Нелли Витальевна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	nelly_p@list.ru	
Платунов Михаил Сергеевич	ИФ СО РАН	platunov@iph.krasn.ru	
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pnk@pnpi.spb.ru	
Подчерзцев Станислав Юрьевич	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	stpcz@mail.ru	127
Покоев Александр Владимирович	СГАУ	pokoev@samsu.ru	
Полунина Александра Анатольевна	ВолГУ	polunina_a@mail.ru	194

Пруткин Александр Игоревич	МГУ, ИК РАН	ai.prutkin@physics.msu.ru	195
Пусенков Илья Валерьевич	СПбГУ	ilyapusenkov@gmail.com	
Пшеничный Кирилл Александрович	ВолГУ	pshcyrill@mail.ru	243
Пыхтина Анна Ивановна	МФТИ (ГУ) / ОИВТ РАН	pykhtina@yandex.ru	128
Разумная Анна Григорьевна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	129
Романова Таисия Андреевна	ФИАН	romanova.taisiya@gmail.com	
Росляков Илья Владимирович	МГУ	ilya.roslyakov@gmail.com	
Рошаль Дарья Сергеевна	ЮФУ	rochal.d@yandex.ru	160
Рувинская Екатерина Егоровна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	ruvinskaia.e.e@mail.ru	
Рулев Максим Игоревич	ОИЯИ	rulevmaksim@gmail.com	161
Румянцева Анастасия Дмитриевна	ФТИ РАН	nasa96@yandex.ru	130
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov@pnpi.spb.ru	
Рунова Маина Константиновна	ПИЯФ НИЦ КИ	runova@pnpi.spb.ru	
Русалёв Юрий Владимирович	МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	yuri.rusalev@gmail.com	244
Руткаускас Антон Владимирович	ОИЯИ	ranton@nf.jinr.ru	36
Рыжов Вячеслав Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ryzhov@ombr.pnpi.spb.ru	
Рыльцев Роман Евгеньевич	ИМЕТ УрО РАН	rrylcev@mail.ru	131
Рыльцева Анастасия Андреевна	Имет УрО РАН	aleaiil@mail.ru	132
Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ НИЦ КИ	savitska@inbox.ru	
Савченков Павел Сергеевич	НИЯУ МИФИ	savch92@gmail.com	37
Сагайдачный Андрей Александрович	СГУ	andsag@yandex.ru	196
Саламатин Денис Александрович	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	68
Самедова Улькер Фаррук	ИФ НАН Азербайджана	neytrino7@gmail.com	133
Саунина Светлана Ивановна	ЧелГУ	saunina@csu.ru	134

Сафиулина Ирина Альбертовна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	ira93@inbox.ru	38
Светогоров Роман Дмитриевич	НИЦ КИ	rdsvetov@gmail.com	69
Селезнева Елена Вячеславовна	ИК РАН	MsDmitrichEva@yandex.ru	135
Селиверстова Дарья Валерьевна	Университет «Дубна»	asya692018@gmail.com	39
Семенов Константин Иванович	ВГТУ	konst1990i@yandex.ru	
Сенкевич Станислав Викторович	ФТИ РАН	SenkevichSV@mail.ioffe.ru	136
Сербо Валерий Георгиевич	НГУ	serbo@math.nsc.ru	13
Серебренников Дмитрий Александрович	БФУ	dserebrennikov @innopark.kantiana.ru	40
Сёмкин Михаил Александрович	УрФУ	m.a.semkin@urfu.ru	41
Сжогина Алина Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	allin_ok2@mail.ru	70
Сизанов Алексей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	alexey.sizanov@gmail.com	198
Сизов Александр Вячеславович	ПИЯФ НИЦ КИ	sizoffav1@mail.ru	
Сирота Марина Александровна	ЮФУ	phys.kam@mail.ru	137, 138
Следнева Анна Сергеевна	Университет «Дубна»	anya-sledneva.94@mail.ru	
Смирнов Федор Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	sigmar40k@yandex.ru	139
Смыслов Руслан Юрьевич	ИВС РАН	urs@mail.macro.ru	
Соколов Александр Иванович	СПбГУ	ais2002@mail.ru	140
Соколов Роман Александрович	НИТУ «МИСиС»	SokolovRMN@gmail.com	
Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	aosorokin@gmail.com	
Стогний Александр Иванович	НАН Беларуси по материаловедению	stognij@ifftp.bas-net.by	
Сулейманов Наиль Муратович	КФТИ КНЦ РАН	nail.suleimanov@mail.ru	
Сумников Сергей Викторович	ОИЯИ	Sumnikovsv@gmail.com	42
Суханов Александр Сергеевич	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	alexander.s.sukhanov @gmail.com	43
Сухарина Галина Борисовна	ЮФУ	sukharina@mail.ru	141

Суясова Марина Вадимовна	ПИЯФ НИЦ КИ	marinasuyasova@pnpi.spb.ru	44
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	svg@pnpi.spb.ru	
Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ НИЦ КИ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Таланов Михаил Валерьевич	ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	142
Тарасова Оксана Сергеевна	ВГТУ	oksanchik2603@mail.ru	199
Тарнавич Владислав Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	45
Таровик Эрнест Григорьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	yurka@lns.pnpi.spb.ru	
Темербулатова Наргиза Талгатовна	БелГУ	tn0901@mail.ru	
Тимофеев Виктор Евгеньевич	ПИЯФ НИЦ КИ	timofeevictor@gmail.com	
Топерверг Борис Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	boristop@thd.pnpi.spb.ru	
Труханов Сергей Валентинович	НАН Беларуси по материаловедению	truhanov@ifttp.bas-net.by	143
Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	vitalja-turchenko@rambler.ru	46, 47
Тюлюсов Антон Николаевич	ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	48
Уклеев Виктор	ПИЯФ НИЦ КИ	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	49
Ульянов Владимир Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ulyanov@pnpi.spb.ru	
Уразбеков Бакытжан Ажитович	Университет «Дубна»	urazbekovb@mail.ru	
Федоренко Анастасия Дмитриевна	ИНХ СО РАН	fad007@ya.ru	
Федоров Владимир Викторович	ФТИ РАН	vfedorov@fl.ioffe.ru	71
Филатов Максим Сергеевич	ВГТУ	36nord36@mail.ru	145
Филинчук Ярослав Евстафьевич	Université catholique de Louvain	yaroslav.filinchuk@uclouvain.be	
Филоненко Елена Михайловна	ЧелГУ	ponochkachan@gmail.com	245
Фуник Антон Олегович	ЮФУ	afounique@gmail.com	146
Хамова Тамара Владимировна	ИХС РАН	ltp@rambler.ru	50
Цветков Дмитрий Сергеевич	МИИТ	tsvetkovd4@gmail.com	

Цвигун Наталья Викторовна	ИК РАН	n_tsvigun@mail.ru	246
Цвященко Анатолий Васильевич	ИФВД РАН	tsvyash@hppi.troitsk.ru	51
Цыпильников Андрей Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	grifft92@gmail.com	200
Чен Тэсик	МИРЭА	chen.tt@mail.ru	72
Черноглазов Константин Юрьевич	НИЦ КИ	expe28@gmail.com	147
Чернышев Владимир Артурович	УрФУ	vchern@inbox.ru	201
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	
Четвериков Юрий Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	yurka@lns.pnpi.spb.ru	162
Чжо Зо Лин	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	kyawzawlinn.49@gmail.com	52
Чижик Станислав Александрович	ИХТТМ СО РАН	csabox@yandex.ru	247
Чуб Дмитрий Сергеевич	МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	dschub@sfedu.ru	202
Чубова Надежда Михайловна	ПИЯФ НИЦ КИ	chubova@lns.pnpi.spb.ru	53
Чукавин Андрей Игоревич	ФТИ УрО РАН	andrey_chukawin@mail.ru	148
Чумаков Алексей Сергеевич	СГУ	lehahares@rambler.ru	248
Чумакова Александра Владимировна	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakova@lns.pnpi.spb.ru	73
Чупраков Илья Александрович	ОИЯИ, Университет «Дубна»	Iluxa@bk.ru	
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	ПИЯФ НИЦ КИ	shapiro@mail.ru	
Шарипов Мирзо Зокирович	БухИТИ	m.z.sharipov@rambler.ru	203
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ РАН	mischar@mail.ioffe.ru	149
Шевцова Янина Александровна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	shevtsova_jana@mail.ru	
Шемет Дарья Борисовна	ЮФУ	shemetdabo@mail.ru	249
Шишкин Иван Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	shishkin@lns.pnpi.spb.ru	74
Шкорняков Сергей Михайлович	ИК РАН	shkornyakov@mail.ru	204
Шмайснер Йоханн	ИТЭФ НИЦ КИ	vny007@mail.ru	205

Шмидт Юрий Александрович	СПбГУ	shmidt9510@gmail.com	
Шурыгина Виктория Александровна	СамГТУ	ShuryginaNTF@yandex.ru	
Энкович Павел Вячеславович	ИФВД РАН	enkovich2007@yandex.ru	206
Энхнаран Уянга	ОИЯИ, ЛНФ	uyanga@jinr.ru	144
Юзюк Юрий Иванович	ЮФУ	yuzyuk@rambler.ru	14
Яблуновский Кирилл Андреевич	ЮФУ	kirill-yablunovskii@mail.ru	207
Ягафаров Шакир Шавкатович	ЧелГУ	shakir@csu.ru	
Ярмолич Марта Викторовна	НАН Беларуси по материаловедению	martochka_ymv@mail.ru	54, 151
Яшина Екатерина Геннадьевна	СПбГУ, ПИЯФ НИЦ КИ	yashina_91@inbox.ru	163, 208

Отпечатано в типографии ФГБУ «ПИАФ» НИЦ «Курчатовский институт»

188300, Гатчина Ленинградской обл., Орлова роща
Зак. 90, тир. 250, уч.-изд. л. 13,5; 03.03.2016 г.