

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

**XLVII Школа ФГБУ «ПИЯФ»
по физике
конденсированного состояния**

ФКС – 2013
11 – 16 марта 2013 г., С.-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2013

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников XLVII Школы ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ФКС-2013), 11 – 16 марта 2013 г., С.-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the XLVII PNPI School on condensed state physics (CSP - 2013). (11 – 16 of March, 2013, St. Petersburg).

Проведению Школы оказали поддержку:

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

Сборник подготовили А.И.Окороков и К.В. Ездакова

Примечание: Тезисы напечатаны без какой-либо редакции издательством. Орфография и пунктуация авторов сохранены.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции.....	4
Стендовые доклады	20
Секция «Синхротронные и рентгеновские исследования».....	20
Секция « Материалы и минералы ».....	45
Секция «Биология и физика».....	55
Секция «Теория, модели и расчеты».....	62
Секция «Нейтронная дифракция»	103
Секция «Структура и свойства материалов».....	135
Список участников	176

Лекции

О квантовой информатике, томографии квантовых состояний и управлении ими

А.И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Современный эксперимент позволяет определять структуру квантовых состояний атомов и фотонов, не разрушая эти состояния, и осуществлять их контролируемое изменение. Ключевую роль в становлении этой новой области физики сыграли работы двух групп, лидеры которых С. Арош и Д. Вайнленд получили Нобелевскую премию по физике в 2012 году.

Начало лекции посвящено элементам квантовой информатики [1,2]. Вводятся понятия кубита, квантового регистра, квантовых вентилях и т. п., обсуждаются запутанные состояния – основа квантовой телепортации и квантовых вычислений. Рассматриваются кубиты в виде фотонов и атомов.

Далее обсуждаются эксперименты по томографии квантовых состояний электромагнитного поля в резонаторе с помощью ридберговских атомов [3]. Показано, что, анализируя картину осцилляций Раби, частота которых зависит от величины поля (числа фотонов), можно найти распределения числа фотонов для разных квантовых состояний поля [4]. Взаимодействие ридберговского атома с полем является инструментом приготовления запутанных (белловских) состояний атома и фотонной моды, которые используют для неразрушающего измерения квантового состояния поля с любым числом фотонов. На этом пути удастся проследить рождение, жизнь и смерть одиночного фотона [5].

Ион (атом) в радиочастотной ловушке [6] реализует квантовый регистр из двух кубитов. Состояния одного из них – электронные подуровни, второго – соседние колебательные термы. Используя фотоны, можно измерять в эксперименте матрицы плотности осцилляторных состояний иона – фоковских, когерентных, смешанных [7]. Подавая на ион последовательность лазерных импульсов нужных частот и длительностей, удастся воспроизвести работу двухкубитового логического элемента CNOT [8] – основы любой квантовой схемы. Подобная техника позволяет также создавать запутанные состояния нескольких ионов.

1. М. Нильсен, И. Чанг. Квантовые вычисления и квантовая информация. «Мир», 2006.
2. А. И. Соколов. Элементы квантовой информатики. Изд. физического факультета СПбГУ, 2012.
3. J. M. Raimond, M. Brune, S. Haroche, Rev. Mod. Phys. 73, 565 (2001).
4. M. Brune, F. Schmidt-Kaler, et al., Phys. Rev. Lett. 76, 1800 (1996).
5. S. Gleyzes, S. Kuhr, et al., Nature 446, 297 (2007).
6. D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe, D. Wineland, Rev. Mod. Phys. 75, 281 (2003).
7. D. Leibfried, D. M. Meekhof et al., Phys. Rev. Lett. 77, 4281 (1996).
8. C. Monroe, D. M. Meekhof et al., Phys. Rev. Lett. 75, 4714 (1995).

Гатчинская школа поляризованных нейтронов (Лекция, посвященная 90-летию Г.М. Драбкина)

А.И. Огороков

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Лекция посвящена развитию в ПИЯФ исследований по физике конденсированного состояния поляризованными нейтронами, основателем и организатором которых был Гильяри Моисеевич Драбкин. 23 декабря 2012 г. ему - доктору физ.-мат. наук, профессору, Лауреату Государственной премии СССР исполнилось 90 лет со дня рождения. Участник Великой Отечественной войны Г.М.Драбкин в 1948 г. с отличием окончил физико-механический факультет ЛПИ им.М.И.Калинина, более 11 лет проработал в оборонной промышленности и в 1957 г. был переведен в филиал ФТИ им. А.Ф.Иоффе (ныне ФГБУ «ПИЯФ им. Б.П.Константинова» НИЦ «Курчатовский институт») на должность старшего научного сотрудника. В преддверии пуска реактора ВВР-М он серьезно занялся организацией нейтронных исследований на Гатчинском реакторе. Большой профессиональный опыт, широкая эрудиция и тонкая интуиция позволили Г.М.Драбкину одному из первых понять исключительную роль поляризованных нейтронов в исследовании магнетиков и за ним по праву признается ведущая роль в мировой практике физического эксперимента с поляризованными нейтронами. В 1962 г. им был предложен новый тип нейтронного спектрометра на основе спинового резонанса в стационарных пространственно периодических магнитных полях, реализованный в дифрактометрах малоуглового рассеяния; была разработана нейтронно-оптическая техника; созданы установки малоуглового рассеяния и проведены широкие исследования фазовых переходов и доменообразования в магнетиках. Впервые экспериментально наблюдались трех-спиновые корреляции в парамагнитной области при нулевом магнитном поле и создана методика исследования спиновых волн в намагниченных ферромагнетиках по асимметрии рассеяния поляризованных нейтронов. Развитые методики 3-х мерного анализа поляризации придали малоугловому рассеянию совершенно новые возможности исследования магнитной мезоструктуры и спиновой динамики магнетиков. Было визуализировано распределение магнитного потока в сверхпроводниках, позволяющее определять критические токи. Практически все работы проводились в тесном сотрудничестве с теоретическим сектором С.В.Малеева.

Созданный Г.М.Драбкиным еще в 60-е годы совместно с С.В.Малеевым экспериментально-теоретический тандем и поныне имеет широкое признание как в нашей стране, так и за рубежом. По сути Г.М. Драбкин и С.В. Малеев являются основателями Школы поляризованных нейтронов в нашей стране.

Яркие пространственно когерентные источники рентгеновского излучения

Г.Н. Кулипанов

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

Развитие источников синхротронного излучения в мире на протяжении последних тридцати лет преследовало достижение различных целей. Основными из них были: повышение спектральной яркости, увеличение энергии генерируемых квантов, использование специфических особенностей синхротронного излучения (поляризация, временная структура, когерентность и т.д.). Важным было и то, что каждый из источников СИ одновременно обслуживал большое число экспериментальных групп (до 60) из различных областей науки.

Существующие и создаваемые источники синхротронного излучения третьего поколения (ESRF, APS, Spring-8, SLS, DIAMOND, PETRA-III, ALBA и др.) являются эффективными фабриками производства новых знаний, новых технологий, новых материалов. Последнее десятилетие активно обсуждается создание рентгеновских источников четвертого поколения. Мировое сообщество выработало требования к этим источникам и предложило несколько путей создания таких источников.

Из всех требований к источникам рентгеновского излучения четвертого поколения наиболее важным является получение полностью пространственно когерентного потока квантов при сохранении величины потока равным тому, что дают источники СИ третьего поколения. Важным требованием является также возможность использования излучения с монохроматичностью ($10^{-3} \div 10^{-4}$) без использования монохроматоров, которые, как правило, портят пространственную когерентность пучка.

Невозможно удовлетворить все требования, предъявляемые к источникам рентгеновского излучения четвертого поколения, используя только один вид источников. Высокую пиковую яркость и фемтосекундную длительность импульсов излучения можно получать, используя рентгеновские лазеры на свободных электронах (ЛСЭ). Остальные требования легче и дешевле реализуются при использовании излучения из длинных ондуляторов, установленных на ускоритель – рекуператор (например MARS), либо на модернизированные накопители с ультрамалым эмиттансом, использовавшиеся до этого для физики элементарных частиц (например, PEP-X).

В лекции проведено сравнение существующих и проектируемых источников рентгеновского излучения 4-го поколения, создаваемых на базе ЛСЭ, ускорителей-рекуператоров и накопителей электронов с ультрамалым эмиттансом.

Molecular magnets: synchrotron x-ray studies

P. Sainctavit

Institute of Mineralogy and the Physics of Condensed Media, Paris, France

X-ray Magnetic Circular Dichroism (XMCD) has proved to be an extremely valuable method in order to determine precise electronic and magnetic properties of ions in magnetic systems. Compared to other magnetic measurements, XMCD experiments is often limited to temperature above 1 Kelvin and to magnetic field below 20 Tesla. In this talk, we shall review recent developments where sub-kelvin temperatures have been obtained and where pulsed magnetic fields as high as 30 Tesla have been applied. The technical concepts of the achievements and the scientific field that can now be covered shall be developed.

Project of diffraction-spectrometric complex for lattice dynamics and diffuse scattering studies

A. Bosak

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

The purpose of the project is the design and the commissioning of an undulator-based diffuse scattering spectrometer as a side station of the inelastic X-ray scattering (IXS) beamline ID28 at the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), and the development of the associated data collection, extraction and treatment software as well as specialized structure and lattice dynamics modeling routines. The proposed instrument shall be primarily dedicated to the study of diffuse scattering in a large class of materials ranging from strongly correlated electron systems and relaxors to nanoscale-modulated and low-dimensional systems. It will constitute a powerful tool in the study of lattice dynamics complementing the inelastic X-ray scattering (IXS) studies and as well will become the first dedicated instrument for the studies of correlated disorder in crystals, where coupling with IXS will allow the separation of (quasi)elastic and inelastic components. The high brilliance of the X-ray source, coupled to state-of-the-art detection schemes will also open the window to time-resolved studies and studies under extreme conditions of pressure, temperature and magnetic fields. When constructed, the diffuse scattering spectrometer in combination to the existing IXS instrument will constitute a world-wide unique experimental station, offering to the large scientific community unprecedented capabilities in the studies of static and dynamic disorder in condensed matter.

Ядерное неупругое рассеяние – новый метод исследования динамики атомных колебаний

А.И. Чумаков

*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France
НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия*

Ядерное неупругое рассеяние (ЯНС) является новым методом исследования спектров атомных колебаний с использованием синхротронного излучения. Метод основан на неупругом (т.е. сопровождающимся рождением или уничтожением фононов) резонансном поглощении рентгеновских лучей ядрами с низколежащими (10-50 кэВ) ядерными уровнями [1]. В настоящее время список исследуемых элементов включает в себя Fe, Sn, Sm, Eu, Dy, K, Kr, Sb, Te и Xe (в ближайшей перспективе – Ge, Ba и Os). Ядерное неупругое рассеяние позволяет измерять парциальную функцию плотности фононных состояний данных элементов в исследуемых веществах [2].

Физическое описание ЯНС тождественно некогерентному пределу неупругого нейтронного рассеяния. Методически ЯНС существенно проще и точнее. Поскольку наблюдаемым процессом является *поглощение* (а не рассеяние), измеряемая функция плотности фононных состояний *идеально* проинтегрирована по волновым векторам. Отсутствие кинематических ограничений, многократного рассеяния, рассеяния на контейнере, отсутствие фона и фиксированное (по всему спектру) энергетическое разрешение позволяют без коррекций измерять точные спектры неупругого рассеяния. Фиксированная величина энергии отдачи позволяет полное вычитание многофононных вкладов и получение точной функции плотности фононных состояний [3]. Погрешность определения числа состояний в различных колебательных модах обычно не превышает нескольких процентов, что позволяет, например, идентификацию колебательных мод просто по площади пиков [4] или определение природы колебательных состояний в стёклах [5].

Более того, высокая чувствительность ядерного резонансного взаимодействия и эффективная фокусировка синхротронного излучения позволяют измерять фононные спектры для предельно малого количества вещества, например, для моно-атомных слоёв [6] или для образцов микронного размера в алмазных наковальнях высокого давления [7].

1. M. Seto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3828 (1995).
2. W. Sturhahn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3832 (1995).
3. V. G. Kohn and A. I. Chumakov, Hyperfine Interactions **125**, 205 (1999).
4. T. Sage *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4966 (2002).
5. A. I. Chumakov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 225501 (2011).
6. T. Slezak *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 066103 (2007).
7. R. Lübberts *et al.*, Science **287**, 1250 (2000).

Молекулярные кристаллы при высоком давлении

Е.В. Болдырева

*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
REC-008, Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

Молекулярные кристаллы - перспективные системы для исследования «взаимоотношений индивидуума и коллектива». Свойства их индивидуальных компонентов определяют структуру и свойства всего кристалла, в то же время, структура и свойства отдельных компонентов часто изменяются при вхождении их в состав кристалла. Как и в случае человеческих коллективов, в молекулярных кристаллах «влияние коллектива на индивидуума» зависит от самого индивидуума, от типа коллектива, а также от внешних условий. Так же как свойства человеческого коллектива или сообществ других живых существ лучше проявляются в экстремальных условиях, свойства молекулярных кристаллов - "коллективов молекул" - нередко удается лучше понять, подвергнув эти системы низким температурам, высокому давлению, действию электрического или магнитного полей и другим экстремальным воздействиям, даже если реально эксплуатироваться эти системы будут в нормальных условиях. Именно с этим, а также с тем, что многие супрамолекулярные системы получаются, существуют, используются, в экстремальных условиях, связан огромный интерес к этой области исследований во всем мире.

В данной лекции будет дан обзор основных направлений исследования молекулярных кристаллов в условиях высоких давлений - от материалов до биомиметиков. Будут рассмотрены основные экспериментальные проблемы и приемы исследования молекулярных кристаллов дифракционными методами. На ряде примеров проиллюстрированы варианты вызываемых повышением давления структурных перестроек - анизотропное сжатие структуры, обратимые или необратимые фазовые переходы без разрушения или с разрушением монокристаллов. Будут приведены примеры влияния на структурные изменения размера частиц, среды, передающей давление, скорости и продолжительности нагружения.

1. Болдырева Е.В. Супрамолекулярные системы в экстремальных условиях // Вестник РАН, 2012, 82, 11, 982-991.

2. Болдырева Е.В. Молекулы под нагрузкой // Природа, 2010, т. 6, с. 3-12.

3. High-Pressure Crystallography. From Novel Experimental Approaches to Applications in Cutting-Edge Technologies (Eds. E. Boldyreva, P. Dera), Springer: Dordrecht, 2010, 622 pp.

Кристаллическая структура и фазовый состав новых высокотемпературных сверхпроводников на основе селенида железа

Д.С. Иносов

Институт физики твёрдого тела имени Макса Планка (MPI-FKF), Штутгарт, Германия

Немногим более двух лет назад в системах $A_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ ($A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) была открыта высокотемпературная сверхпроводимость с характерной температурой перехода $T_c = 32 \text{ K}$ [1]. Вскоре рентгеноструктурный анализ и нейтронная дифракция выявили в этих системах ярко выраженную $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ сверхструктуру вакансий железа, приводящую к антиферромагнитному упорядочению железной подрешётки уже при температурах существенно выше комнатной [2]. Локальное сосуществование столь сильного магнитного порядка со сверхпроводимостью представлялось невозможным как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. Ряд дополняющих друг друга экспериментов впоследствии выявил наличие двух независимых фаз, различных как по структурному составу, так и по электронным свойствам, одна из которых обладает вышеупомянутой сверхструктурой и является антиферромагнитным изолятором (около 80–90%), в то время как вторая фаза с металлическими свойствами ответственна за сверхпроводящий переход (около 10–20%). Синтезировать сверхпроводящую фазу в чистом виде до сих пор не удалось.

Понять истинную кристаллическую структуру и электронные свойства сверхпроводящей фазы удалось лишь благодаря удачному сочетанию ряда экспериментальных методов, включая рентгеновскую дифракцию, неупругое нейтронное рассеяние, ядерный магнитный резонанс, и фотоэлектронную спектроскопию. В частности, мы исследовали спектр низкоэнергетических спиновых флуктуаций при помощи нейтронного рассеяния и выявили наличие т.н. *резонансной моды*, представляющей собой отклик системы на сверхпроводящий переход [3]. Положение этого сигнала в обратном пространстве качественно отличалось в новых селенидах железа и в известных ранее ферропниктидах и позволило численно оценить уровень электронного допирования плоскости FeSe , а также исключить наличие сверхструктуры вакансий в сверхпроводящей фазе. Была также оценена абсолютная величина интегральной спектральной интенсивности резонансной моды в абсолютных единицах. Перечисленные результаты не зависели от типа щелочного металла (A) в соединении.

1. J. Guo *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 180520 (2010); A. F. Wang *et al.*, Phys. Rev. B **83** 060512(R) (2011); A. Krzton-Maziopa *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 052203 (2011).
2. Z. Shermadini *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 117602 (2011); V. Y. Pomjakushin *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 144410 (2011); F. Ye *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 137003 (2011); W. Bao *et al.*, Chin. Phys. Lett. **28**, 086104 (2011).
3. J. T. Park *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 177005 (2011); G. Friemel *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 140511 (2012); G. Friemel *et al.*, EPL **99**, 67004 (2012).

Законы сохранения, известные и неизвестные, в классической и релятивистской механике

С.Н. Манида

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Фундаментальные законы сохранения связаны со свойствами симметрии пространства-времени. Широко известные свойства - однородность и изотропность. Не менее известно, но реже осознается свойство «инерциальности» - существование и равноправие инерциальных систем отсчета. Таким набором свойств может обладать лишь пространство-время постоянной кривизны: плоское (Минковского), положительной кривизны (де Ситтера), отрицательной кривизны (анти-де Ситтера)

Только в этих пространствах существуют 10 законов сохранения - энергии, импульса, момента импульса и закон движения центра масс.

В нерелятивистской же физике существуют еще два непрерывных преобразования симметрии - трансляции обратного времени (порождаемые так называемой «explosion-implosion» симметрией) и специальные пространственно-временные дилатации. Таким образом, в нерелятивистском свободном от внешних полей облаке точечных частиц сохраняются в процессе движения двенадцать, а не десять физических величин! А соответствующая группа симметрии оказывается группой симметрии свободного уравнения Шредингера!

Известно, что в нерелятивистском пределе пространства Минковского получается пространство Галилея с десятью законами сохранения. Известно также, что в «некосмологическом» пределе пространства анти-де Ситтера получается пространство Минковского (s -пространство). Но совершенно неизвестно, что в «нерелятивистском» пределе пространства анти-де Ситтера получается некий «космологический» аналог пространства Минковского (R -пространство), а из него в «некосмологическом» пределе получается пространство пара-Галилея тоже с десятью законами сохранения, но с другой формой закона сохранения энергии. Объединение этих двух пределов и дает двенадцати параметрическую группу симметрии Шредингера.

С мировоззренческой точки зрения возникает некая двойственность в описании окружающего нас мира. Дополнительные законы сохранения в нерелятивистской физике указывают на то, что реальный мир – не мир s -пространства и не мир R -пространства, а и мир s -пространства, и мир R -пространства. А точнее говоря, каждый из нас вправе сам выбирать, какая форма описания окружающего мира более подходит в той или иной конкретной ситуации....

Детерминированный хаос Невозможное возможно?

Н.Е. Савицкая

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Феномен, называемый «детерминированным хаосом» сводит вместе, казалось бы, несовместимые понятия: предопределенность (детерминизм) и непредсказуемость (хаос). Несмотря на такую парадоксальность, это явление реализуется во многих системах, относящихся к различным областям нашей жизни, таким как биология, социология, физика, искусство и др.

На лекции вы сможете узнать:

- какое же явление называется детерминированным хаосом;
- как развивалась наука о хаосе;
- каковы отличительные черты систем, в которых может возникать детерминированный хаос;
- что такое странный аттрактор и как это понятие связано с понятием «фрактал»;
- каковы математические характеристики хаотического движения;
- по каким сценариям происходит переход к хаотическому движению;
- в каких областях нашей жизни возможно столкновение с хаосом.

Также вы увидите на конкретных примерах, как происходит переход к хаосу и как возникают странные аттракторы. А после лекции всем желающим представится уникальная возможность создать и унести с собой свой собственный фрактал.

Высокотемпературные мономолекулярные магниты: современное состояние проблемы и новые подходы

В.С. Миронов

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Рассматривается современное состояние и перспективы проблемы высокотемпературных мономолекулярных магнитов (ММ; Single-Molecule Magnet, SMM; открыты в 1993 г.) - единичных молекул с эффектом магнитной памяти. Ниже температуры блокирования намагниченности (T_b) ММ способны фиксировать магнитный момент и сохранять его длительное время (месяцы, годы). ММ являются квантовыми объектами с уникальными магнитными свойствами (квантовое туннелирование намагниченности); их рассматривают в качестве перспективных материалов для молекулярной электроники [1].

Все существующие ММ имеют низкую критическую температуру ($T_b < 5$ К). Для существенного повышения T_b необходимо радикально (на порядки) увеличить внутримолекулярную магнитную анизотропию. Наиболее перспективный подход основан на введении в структуру ММ орбитально-вырожденных 4d и 5d комплексов с размороженным орбитальным моментом. При сочетании с высокоспиновыми 3d ионами такие комплексы образуют обменно-связанные 4d-3d и 5d-3d пары с сильно анизотропными обменными взаимодействиями (изинговского типа), являющиеся чрезвычайно эффективным источником магнитной анизотропии [2-4]. Рассмотрены различные типы орбитально-вырожденных 4d и 5d комплексов, исследованы механизмы анизотропных обменных взаимодействий с их участием и установлены основные закономерности структурно-магнитных корреляций. Сформулированы общие принципы и критерии для поиска и отбора наиболее перспективных 4d и 5d комплексов для их использования в качестве молекулярных строительных блоков с целью создания высокотемпературных ММ. Предложены конкретные молекулярные структуры ММ с ожидаемой температурой блокирования намагниченности T_b несколько десятков К. Базовые принципы концепции высокотемпературных ММ полностью подтверждены результатами последних экспериментальных и теоретических исследований магнитных свойств ММ на основе орбитально-вырожденных комплексов $\text{Os}^{\text{III}}(\text{CN})_6^{3-}$, $\text{Mo}^{\text{III}}(\text{CN})_7^{3-}$ и $\text{Re}^{\text{IV}}(\text{CN})_7^{3-}$ [5,6].

1. D. Gatteschi, R. Sessoli, *Angew. Chem. Int. Ed.* **42**, 268 (2003)
2. V.S. Mironov, L.F.Chibotaru, A.Ceulemans, *J. Amer. Chem. Soc.* **125**, 9750 (2003).
3. В.С. Миронов, Докл. РАН (физическая химия) **408**, 348 (2006).
4. В.С. Миронов, Докл. РАН (физическая химия) **415**, 357 (2007).
5. J. Drieser et al., *Chem. Eur. J.* **19**, (2013).
6. X.-Y. Wang et al., *Nature Chem.* **5**, (2013).

Новости с озера Восток в Антарктиде

С.А. Булат

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Будут дан обзор подледникового озера Восток (история открытия, бурение и известные биогеохимические данные по результатам анализа керна льда Восток), рассмотрены возможности экстремальной подледниковой среды озера Восток (Восточная Антарктида) в плане поддержания микробной жизни и выведена предварительная оценка биогеохимического потенциала озера. Будут приведены результаты молекулярно-микробиологического анализа поверхностного снега в районе станции Восток и по направлению к береговой черте, а также образцов атмосферного и, главное, озерного льда керна льда Восток, полученные за последние 10 лет. В заключение будут приведены первые результаты исследования образцов озерной воды, намерзшей на буровую коронку (проникновение состоялось 5 февраля 2012 г.), а также планы по комплексному исследованию водной толщи озера методами филогенетики (метагеномики) и биофизики на ближайшие 10 лет в астробиологическом контексте.

1. Lukin V. and S. Bulat. Vostok subglacial lake: Details of Russian plans/activities for drilling and sampling. Ch. 11, In Antarctic Subglacial Aquatic Environments (eds M.J. Siegert, M.C. Kennicutt II, R.A. Bindschadler), Geophysical Monograph Series, 2011, vol. 192, P. 187-197.
2. Bulat S., J-R. Petit. Vostok, Subglacial Lake. In Encyclopedia of Astrobiology, Editor-in-chief: Gargaud, Muriel, eds. Amils, R.; Cernicharo Quintanilla, J.; Cleaves II, H.J.; Irvine, W.M.; Pinti, D.; Viso, M., 1st Edition., 2011, XLIV, 1851 p., 3 volumes, ISBN 978-3-642-11271-3, Springer-Verlag GmbH Berlin Heidelberg, pp 1754-1758.
3. Bulat S.A., Marie D., J.R. Petit. Prospects for life in the subglacial Lake Vostok, East Antarctica. Лед и Снег, 2012, Т. 4, Вып. 120: 92-96

MnSi в 2012 году
(скирмионы, квантовая критичность и магнитная фазовая диаграмма)

С.В. Демисhev

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

В докладе представлен обзор новых результатов по магнитным и транспортным свойствам моносилицида марганца, MnSi. Обсуждаются визуализация скирмионных состояний в тонких пленках MnSi, а также достигнутый прогресс в области исследования квантовых критических явлений под давлением. Подробно анализируется экспериментальная ситуация с магнитной фазовой диаграммой MnSi, включая проблему «отрицательного давления» в эпитаксиальных пленках. Рассматриваются магнитные фазы в окрестности температуры Кюри в слабом магнитном поле и область сильных магнитных полей, отвечающих переходу между парамагнитной и спин-поляризованной фазами. Установлено, что магнитное рассеяние носителей заряда у MnSi количественно описывается моделью Иосиды. Этот результат, дополненный данными по магнитному резонансу, заставляет критически отнестись к стандартному объяснению магнитных свойств MnSi в рамках модели зонного магнетизма. В качестве альтернативного подхода рассматривается образование квазисвязанных электронных состояний (спиновых поляронов) в окрестности локализованных магнитных моментов ионов марганца [1].

1. S. V. Demishev, V. V. Glushkov, et al., Phys. Rev. B 85, 045131 (2012)

Spin helix in magnetic field and A-phase in MnSi

S.V. Maleyev

Petersburg Nuclear Physics Institute, NRC Kurchatov Institute, Gatchina, Russia

Any spin helix is determined by two vectors: helix wave-vector \mathbf{k} and normal to the spin rotation plane \hat{c} . In classical approximation the helix feels the field component H_{\parallel} along \hat{c} only and the spins incline opposite to the field on the angle determined as $\sin \alpha = -H_{\parallel}/H_C$ where $H_C = Ak^2$ is the critical field for ferromagnetic transition and A is the spin-wave stiffness. The perpendicular field component \mathbf{H}_{\perp} is connected to the spin harmonics $\mathbf{S}_{\pm\mathbf{k}}$ and give rise a mixture spin-wave harmonics with momenta 0 and $\pm\mathbf{k}$. As a result we get the magnon Bose-Einstein condensation with momenta $n\mathbf{k}$ where $n = 0; 1; \dots$

In the case of *MnSi* there is a competition between classical and BEC energies. The first order transition with \mathbf{k} rotation perpendicular to the field occurs at $H_{C1} = 0.46H_C$. This result holds in the linear spin-wave theory. With further field increasing it fails and the upper boundary H_{C2} for downward \mathbf{k} rotation to the parallel orientation van not be determined in the linear theory.

In the field range $H_{C1} < H < H_{C2}$ there is a coexistence of conventional conical phase and magnetized clusters with randomly orientated $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$. The clusters interact as magnetic dipoles. At low T we have a dipolar glass. With rising T the dipoles are trying to diminish the magnetic energy. The reentrant transition to hexagonal state provides this minimum.

Магнитная кристаллография и дифракция нейтронов – что нового?

А.М. Балагуров

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Магнитная кристаллография – описание с помощью кристаллографических понятий магнитных структур кристаллов – постепенно приобретает черты вполне сформировавшейся науки. Сформулированы и проверены физические модели возникновения в кристаллах упорядоченного магнитного состояния. Создана и успешно функционирует необходимая экспериментальная техника, основанная, прежде всего, на дифракции медленных нейтронов. Ясны основные этапы определения магнитной структуры, включающие определение волнового вектора структуры, величин и ориентаций магнитных моментов атомов. Наконец, разработаны и освоены четкие алгоритмы анализа экспериментальных дифракционных данных по магнитным структурам. В основном они связаны с двумя весьма элегантными способами кристаллографического описания магнитных структур – “симметричным” и “представленным”. Первый основан на шубниковских или цветных группах симметрии, второй – на неприводимых представлениях федоровских групп. Одно время казалось, что центр тяжести сместился в сторону “представленного” пути. Это проявлялось во введении в повседневную практику нескольких удобных пакетов программ, позволяющих предельно четко отобрать возможные варианты магнитной структуры конкретного соединения и провести анализ степени их соответствия экспериментальным данным. Однако в последнее время в этом же направлении развивается и “симметричный” путь. Обсуждение именно этого аспекта составляет основное содержание лекции. Вводная часть состоит из краткого изложения основных сведений о магнетизме кристаллов. Кроме того, будут затронуты вопросы получения экспериментальных данных с помощью дифракции нейтронов и некоторых дополнительных методик.

Компьютерное моделирование установок нейтронного рассеяния как необходимый инструмент для конструирования современных нейтронных приборов

А.И. Иоффе

Jülich Centre for Neutron Science, Garching, Germany

В течении последних нескольких лет компьютерное моделирование (симулирование) нейтронно-оптических трактов и приборов нейтронного рассеяния стало стандартным и очень мощным методом их разработки. С одной стороны это обусловлено созданием мощных специализированных программных пакетов, основанных на методе Monte-Carlo (MC) (например, McStas и VITESS), с другой стороны рациональностью такого подхода, позволяющего оценить параметры, проверить функциональность прибора и оптимизировать его концепцию и конструкцию с целью получения наилучших параметров до стадии практической реализации.

MC симулирование позволяет выйти за пределы аналитических вычислений и оперировать реальными, а не идеальными нейтронными пучками и компонентами приборов, и избежать возможных ошибок в конструкции. Именно поэтому в настоящее время MC симулирование всегда предшествует «железной фазе» создания приборов, особенно требующих многомиллионных и, как правило, необратимых инвестиций.

В этой лекции будут рассмотрены основы MC метода моделирования современных нейтронных приборов и продемонстрированы (в том числе on-line) его применения для симулирования нейтроноводов сложной геометрии, фокусирующих элементов и устройств с нетривиальной спиновой динамикой для работы с поляризованными нейтронами.

Секция «Синхротронные и рентгеновские исследования»

Моделирование энергетических спектров запрещенных отражений в кристалле RDP вблизи К-края рубидия

*К.А. Акимова¹, Е.Н. Овчинникова¹, В.Е. Дмитриенко², Э.Х. Мухамеджанов³,
D.V. Novikov⁴, C. Richter⁴*

¹Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

³Курчатовский ИБКИ центр, Москва, Россия

⁴Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Hamburg, Germany

В работе исследована температурная зависимость «запрещенных» отражений 006 и 550, которые возникают при резонансной дифракции синхротронного излучения в кристаллах RbH_2PO_4 (RDP) при энергии падающего излучения, близкой к К-краю рубидия. На синхротроне DESY были измерены энергетические спектры указанных отражений в широком интервале температур, а также спектр EXAFS. Экспериментальные исследования показали резкий скачок интенсивности отражения 006 при температуре 147 К, соответствующей фазовому переходу из пара- в сегнетоэлектрическую фазу. В параэлектрической фазе интегральная интенсивность обоих рефлексов не падает в соответствии с фактором Дебая-Валлера, а растет. Для отражения 550 температурная зависимость более резко выражена, чем для отражения 006.

В данной работе проводится математическое моделирование энергетических спектров «запрещенных» отражений при различных температурах с целью объяснения наблюдаемых экспериментальных данных. Показано, что оба отражения являются результатом интерференции трех резонансных вкладов в атомный фактор: диполь-квадрупольного, термоиндуцированного, а также вклада, обусловленного мгновенными конфигурациями протонов.

Феноменологическое рассмотрение всех трех вкладов в структурную амплитуду запрещенных отражений было проведено в работе [1].

Учет всех трех вкладов в резонансное рассеяние синхротронного излучения позволяет описать наблюдаемое поведение интегральной интенсивности запрещенных отражений в RDP с температурой.

Работа поддержана грантом РФФИ № 10-02-00768. Вычисления проводились на суперкомпьютере СКИФ МГУ.

1. Э.Х. Мухамеджанов, М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, Е.Н. Овчинникова, Е.В. Трошков, В.Е. Дмитриенко. Кристаллография, 2010, том 55, № 2, с. 187–196.

Структурные изменения лабунцовита-Fe при давлении от 0 до 23 ГПа

*С.М. Аксенов¹, Е.А. Быкова², А.В. Курносов², И.П. Макарова¹,
Н.А. Дубровинская², Л.С. Дубровинский², Н.В. Чуканов³*

¹ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия*

² *Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Bayreuth, Germany*

³ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

Специфические «цеолитные» свойства минералов и неорганических соединений с гетерополиэдрическими каркасами зависят от их структурных особенностей - строения имеющих в них каналов и полостей [1]. Несмотря на интерес к этим материалам и их свойствам с точки зрения практического применения, данные о структуре этих соединений при высоких давлениях отсутствуют, что связано в первую очередь с трудностями получения набора экспериментальных данных при использовании лабораторных дифрактометров.

Минералы группы лабунцовита имеют общую формулу ($Z=1$): $A_4B_4C_4 \cdot x[D_x(H_2O)_{2x}][M_8(O,OH)_8[Si_4O_{12}]_4 \cdot 8H_2O$ ($A = Na, Ca$; $B = K, Na, H_3O$; $C = K, Ca, Sr, H_3O, H_2O, OH$; $D = Fe^{2+}, Mn, Zn, Mg$; $M = Ti, Nb, Fe^{3+}, Fe^{2+}$ и $x = 0 - 2$) и состоят из цепочек $(Ti, Nb)O_6$ -октаэдров, объединенных четырехчленными кольцами $[Si_4O_{12}]$ в гетерополиэдрический каркас, полости которого заполнены щелочными катионами и молекулами воды.

Кристаллическая структура природного лабунцовита-Fe (эмпирическая формула $Na_2K_2Ba_{0.7}Fe_{0.5}Ti_4(Si_4O_{12})_2(OH, O)_4 \cdot 5H_2O$ была определена ранее при нормальных условиях: пр.гр. $C2/m$, $Z=2$, $a=14.234(2)$ Å, $b=13.7742(7)$ Å, $c=7.7741(8)$ Å, $\beta=116.79(2)^\circ$.

В настоящей работе представлены результаты рентгеноструктурных исследований монокристаллического образца лабунцовита-Fe *in situ* в алмазных наковальнях. Все измерения выполнены на линии ID09A (ESRF, Гренобль). Данные получены при давлении до 22.5 ГПа с шагом ~ 2.5 ГПа.

Нами установлена зависимость объема элементарной ячейки лабунцовита-Fe от давления. По полученным данным было уточнено уравнение состояния Бирча-Мурнагана третьего порядка ($K = 72(2)$ ГПа и $K' = 3.7(2)$ с $V_0 = 1363(2)$ Å³).

1. N.V. Chukanov, I.V. Pekov Review in Mineralogy and Geochemistry. 57. 105-144. (2005).

Критерий Иоффе-Регеля и неупругое рентгеновское рассеяние в стеклах

Я.М. Бельтюков¹

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Задача о распространении колебательных возбуждений в неупорядоченных средах является одной из актуальных проблем в физике конденсированного состояния. Микроскопическая природа таких возбуждений до сих пор остается малоизученной, несмотря на то, что она отвечает за такие важные явления, как теплоемкость, теплопроводность и распространение звука в аморфных диэлектриках.

Самые низкочастотные колебательные возбуждения в стеклах – это плоские продольные или поперечные волны (акустические фононы). С ростом частоты на фононы все больше оказывает влияние беспорядок, что ведет к уменьшению длины свободного пробега. При некоторой частоте, называемой частотой Иоффе-Регеля ω_{IR} , длина свободного пробега становится настолько малой, что сравнивается с длиной волны. Однако, колебания не локализуются, а изменяют режим распространения с баллистического на диффузионный, оставаясь при этом делокализованными. Неупругое рентгеновское рассеяние в стеклах для частот выше ω_{IR} дает загадочное поведение для ширины фононной линии $\Gamma \sim q^2$ [1, 2].

Для объяснения этой зависимости мы исследовали динамический структурный фактор колебаний $S(\mathbf{q}, \omega)$ в случайной решетке, построенной ранее с помощью случайных матриц [3,4,5]. Мы показали, что структурный фактор колебаний с частотами выше ω_{IR} хорошо соответствует структурному фактору марковских случайных блужданий смещений атомов от атома к атому

$$S_{rw}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\Gamma(\mathbf{q})}{\omega^2 + \Gamma^2(\mathbf{q})},$$

где ширина линии при малых значениях волнового вектора q имеет вид $\Gamma = Dq^2$, где D – коэффициент диффузии. Такая зависимость полностью совпадают с экспериментальной.

1. F. Sette et al, Science **280**, 1550 (1998).
2. G. Ruocco and F. Sette, J. Phys.: Condens. Matter **13**, 9141 (2001).
3. Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин, ФТТ **53**, 142 (2011).
4. Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин, Письма в ЖЭТФ **93**, 661 (2011).
5. Я.М. Бельтюков, В.И. Козуб, Д.А. Паршин. Письма в ЖЭТФ **96**, 641 (2012).

Исследование внутренней доменной структуры нанокристаллического и аморфного кремния методом МУРР

Н.С. Белякова^{2,1}, М.Е. Бойко¹, М.Д. Шарков¹

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

В настоящее время человечество столкнулось с необходимостью решения долгосрочных энергетических проблем, обусловленных, прежде всего, близкой перспективой исчерпания традиционных источников энергии и серьезными опасениями за экологическое состояние Земли.

Для массового применения солнечного излучения необходимо обеспечить эффективное его использование и значительно улучшить экономические характеристики солнечных элементов. Перспективным подходом в направлении решения проблемы изготовления дешевых преобразователей солнечной энергии является разработка технологии тонкопленочных солнечных элементов на основе аморфного и микрокристаллического кремния.

На физические свойства фотоэлектрических солнечных элементов оказывает значительное влияние размер как микрокристаллических доменов, так и частиц аморфного кремния. При травлении у кремниевых пластин для солнечных элементов образуются столбчатые домены, состоящие из микрокристаллов кремния $\mu\text{-Si}$, вытянутых перпендикулярно поверхности. Ближе к поверхности образуется аморфный $\alpha\text{-Si}$. (рис. 1)

Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (МУРР) может быть использовано как для исследования поликристаллических материалов, так и для характеристики несовершенства кристаллов, в частности, доменов пор при травлении кремниевых пластин для создания фотоэлектрических солнечных элементов.

С помощью методики МУРР проводились наблюдения динамики роста доменов в кристалле в процессе травления и образования нанокристаллического ($\mu\text{-Si}$) и аморфного ($\alpha\text{-Si}$) кремния. На основе данных МУРР были определены 3D параметры столбчатых призм на поверхности $\mu\text{-Si}$ солнечных батарей на разных этапах травления и предложены кристаллическая модель распределения пор и кластерно-кристаллическая модель распределения доменов в $\mu\text{-Si}$. В то же время результаты анализа слоев $\alpha\text{-Si}$ характерны для распределения кристаллитов по газовой модели с вариациями плотности в зависимости от этапа травления.

Показано, что в образцах $\mu\text{-Si}$ домены имеют форму вытянутых вдоль нормали к поверхности колонн длиной 700 нм и толщиной 20-60 нм, в $\alpha\text{-Si}$ – сферических частиц до 40-60 нм в диаметре. Сформулировано предположение о том, что в $\alpha\text{-Si}$ домены внутри слоя образуют нерегулярную сеть.

Исследование структурных изменений в тонких кальций фосфатных плёнках на титане методом дифрактометрии СИ

А.Б. Беркин¹, В.В. Дерябина¹, М.Р. Шарафутдинов²

¹ Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

² Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

Кальций фосфатные покрытия нашли широкое применение в области ортопедии и стоматологии. Важными медико-биологическими характеристиками таких покрытий является их химический состав и структура. Известно, что аморфные пленки быстро растворяются в биологических средах и характеризуются более низкой биоактивностью, чем кристаллические [1]. Для увеличения биосовместимости и остеосинтеза необходимо использовать покрытия, близкие по характеристикам к биологическому гидроксиапатиту. Установлено, что для всех технологических процессов формирования кальций - фосфатных покрытий наблюдается сильная зависимость структуры и состава покрытий от режима нанесения и термической обработки.

Для изготовления медицинских имплантатов используется пористый титан, на который наносится тонкий (порядка 1 мкм) слой кальций фосфатного покрытия. Получение дифракционной картины на тонких плёнках, сформированы на поверхностях с развитым микрорельефом, является ложной задачей. Высокая интенсивность и малая расходимость пучка СИ позволяет решить эту задачу. Кроме того, появляется возможность исследования динамики структурных преобразований в тонких плёнках непосредственно в процессе термического отжига.

Исследования структуры кальций-фосфатных пленок выполнены в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ) ИЯФ СО РАН на станции «Дифракционное кино». Для регистрации дифрактограмм использовался однокоординатный детектор ОД-3М [2]. Идентификация полученных спектров производилась с помощью базы данных JCPDS [3].

В работе впервые исследовано влияние температуры и времени термического отжига на формирование структур тонкоплёночных кальций фосфатных покрытия на пористой поверхности оксидированного титана. Определены температурные режимы для получения заданной степени кристаллизации тонких покрытий.

1. Yang Y, Kim K-H and Ong J. L., *Biomaterials*, V. 26. P. 327. (2005).
2. Aulchenko V.M., Bukin M.A., Sharafutdinov M.R.// *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A*. T. 405. № 2-3. С. 269. (1998).
3. The International Centre for Diffraction Data (ICDD) *Diffraction Data (ICDD)*, (Database Joint Committee on Powder Diffraction Standards (JCPDS)). <http://rapidog.com/jcpds-database-rapidshare.html>.

**Определение структуры композитов на основе
целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus*
методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения**

*К.В. Ездакова¹, Г.П. Копица¹, Р.Ю. Смыслов², А.Н. Бугров², Т.Н. Некрасова²,
А.К. Хрипунов², В. Angelov³, А. Жигунов³*

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

² *Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic*

В современном мире наиболее перспективными материалами являются биodeградируемые и безопасные материалы, получаемые из дешевых возобновляемых в природе источников сырья. Этим основным условиям отвечает целлюлоза. В особенности широкое применение находят нано-гель пленки целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus* (ЦГх) в качестве матрицы для получения разнообразных органо-неорганических композитов. Известны композиты на основе целлюлозы, содержащие наночастицы серебра, золота, селена, TiO₂, SiO₂, CdSe, фосфат кальция и фракции шунгита [1-4]. Способность ЦГх сорбировать различные низко- и высокомолекулярные органические соединения, а также неорганические нанонаполнители как в виде гель- пленки, так и в виде суспензий (в воде, этаноле, толуоле и др.) делает её перспективным материалом для создания композиционных материалов, которые могут найти широкое применение в медицине (например, для создания универсального раневого покрытия, прекурсора кости, хряща и т.д.), мембранной технологии и различных областях оптоэлектроники.

В данной работе методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения исследовалась мезоструктура композитов на основе ЦГх (нами был использован штамм ВКМ В-880) с наночастицами ZrO₂ и/или гидроксиапатитом, включающие люминесцентный зонд. В качестве такого зонда были использованы ионы Tb³⁺ в виде низкомолекулярной соли TbCl₃×6H₂O или комплекса с полимерным лигандом.

Из анализа данных малоуглового рассеяния было определено распределение наночастиц по размерам, а также прослежена эволюция структуры композитов на основе ЦГх в зависимости от типа допантов.

1. Maria L.C.S., Santos A.L.C., Oliveira P.C., et al. // *Materials Letters*. 2009. V.63. p. 797-799
2. Wang W., Zhang T.J., Zhang D.W., et al. // *Talanta*. 2011. V.84 p. 71-77
3. Gutierrez J., Tercjak A., Algar I., et al. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2012. V.377. p. 88-93
4. Yang Z., Chen S., Hu W. et al. // *Carbohydrate Polymers*. 2012. V.88. P. 173-178

Фурье анализ на основе рентгеновской преломляющей оптики для решения задач высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии

*П. Ершов^{1,2}, С. Кузнецов³, В. Юнкин³, И. Снигирева², А. Гойхман¹,
А. Снигирев²*

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

² *Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция*

³ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

Кроме того, что за счет рефракционных линз[2] можно фокусировать рентгеновское излучение, с их помощью можно производить одномерное и двумерное Фурье преобразование падающего на них волнового фронта. Это было продемонстрировано для жесткой области рентгеновского излучения как теоретически[3], так и экспериментально[4]. На основе этого свойства преломляющих линз была успешно применена новая методика для исследования фотонных и коллоидных кристаллов[5].

В настоящей работе мы использовали рефракционные линзы как Фурье анализатор для высокоразрешающей рентгеновской дифракции. Мы исследовали два типа образцов в брэгговской геометрии: периодическую решетку, сформированную пленками оксида кремния на подложке кремния и периодическую решетку, сформированную посредством травления кристалла кремния. Фурье изображение волнового фронта, образованного в результате дифракции на исследуемых образцах, было получено для разных точек на кривой качания кремния (111) при энергии рентгеновского излучения равной 16,5 КэВ. Эксперименты были проведены на станциях BM5 и ID6 европейского источника синхротронного излучения в г. Гренобль, Франция (ESRF).

К преимуществам предложенной Фурье методики следует отнести способность моментальной развертки волнового фронта, что не осуществимо в случае трехкристальной дифрактометрии, в которой развертка формируется путем сканирования кристалл-анализатором. Благодаря этому открывается возможность регистрации быстрых процессов(например, поверхностных акустических волн) в кристаллах. Дальнейшее развитие Фурье анализа дифрагированного излучения посредством рефракционных линз может способствовать в создании рентгеновского микроскопа, который, по аналогии с электронным микроскопом, может формировать изображения реального и обратного пространства исследуемого кристалла.

1. A. Snigirev, I. Snigireva, M. Grigoriev, V. Yunkin, et al., J.of Physics: Conference Series 186, 012072, 2009
2. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva and B. Lengeler, Nature, vol. 384, 49-51, 1996
3. V. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, Optics Communications, vol. 216, 247-260, 2003
4. M. Drakopoulos, A. Snigirev, I. Snigireva, J. Schilling, APL, 86, 014102, 2005
5. A. Bosak , I. Snigireva, K. Napolskii and A. Snigirev, Adv. Mater., 22, 3256–3259, 2010

Исследование динамики водородных связей и фазовых переходов в солях и смешанных кристаллах аминокислот: совмещение рентгеноструктурного анализа и КР-спектроскопии

Б.А. Захаров^{1, 2}, Е.А. Лосев^{1, 2}, Б.А. Колесов^{2, 3}, Е.В. Болдырева^{1, 2}

¹ Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

² REC-008, Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

³ Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия

Изучение молекулярных кристаллов при нестандартных условиях, таких как высокие давления и низкие температуры, позволяет выявить межмолекулярные взаимодействия, их роль в формировании и устойчивости структуры при внешних воздействиях. В этом отношении особый интерес представляют кристаллы, содержащие аминокислоты (например, соли и сокристаллы). Некоторые из них обладают ферроэлектрическими, пьезоэлектрическими, нелинейно-оптическими свойствами; данные по отклику таких структур на изменения температуры или давления могут быть использованы для изучения биомолекул (белков).

В данной работе на примере нескольких объектов демонстрируются возможности совместного применения рентгеноструктурного анализа и КР-спектроскопии (в том числе, поляризационной) для выявления тонких эффектов, связанных с изменениями в сетке водородных связей. Показано, что внешние воздействия по-разному влияют на различные типы водородных связей. Для дигидрата оксалата *бис*-DL-сериния и моногидрата гидрооксалата DL-аланиния удалось выявить зависимости частот валентных колебаний от расстояния между донором и акцептором для некоторых выбранных водородных связей при охлаждении образцов. Был обнаружен фазовый переход в смешанном кристалле глицина с глутаровой кислотой и исследованы водородные связи при охлаждении. Также были исследованы фазовые переходы в дигидрате оксалата *бис*-DL-сериния, моногидрате гидрооксалата DL-аланиния, смешанном кристалле глицина с глутаровой кислотой в условиях высоких давлений.

На примере совместных дифракционных и спектроскопических исследований DL-серина при высоких давлениях удалось выявить некоторые эффекты, которые были не замечены в более ранних исследованиях. Остальные объекты исследовались при низких температурах и высоких давлениях впервые, и для них также были показаны преимущества совместного применения КР-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа для выявления тонких эффектов в межмолекулярных взаимодействиях, в отличие от их раздельного использования.

Работа была поддержана грантами РФФИ (12-03-31541 мол_а), Минобрнауки России (14.В.37.21.1093), программами РАН 5.6.4 и 24.38.

Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ электрофоретически обогащенного диатомита

С.А. Нестерова ¹, Н.Н. Иванская ²

¹Ульяновский комбинат строительных материалов, Ульяновск, Россия

²Ульяновское высшее авиационное училище гражданской авиации (институт), Ульяновск, Россия

Диатомит – осадочная тонкопористая опаловая порода, состоящая в основном из створок диатомовых водорослей. Качество нативного диатомита Поволжских месторождений не позволяет применять его как фильтровальный материал в пищевой промышленности без предварительного обогащения породы из-за повышенного содержания оксидов железа и алюминия, находящихся в основном в составе глинистых примесей. Разделять глинистые и кварцевые частицы исходного сырья возможно электрофорезом. Глинистые частицы, несущие отрицательный заряд, притягиваются анодом, частицы, не имеющие заряда или несущие положительный заряд, частично осаждаются на катоде, а основная их масса уносится с суспензией.

В работе определяли зависимость фазового состава электрофоретически обогащенного диатомита Ульяновской области от плотности тока и концентрации электролита. В эксперименте через густую водную суспензию диатомита с добавлением триполифосфата натрия концентрацией от 0 до 2,5 % пропускали постоянный электрический ток плотностью до 1,5 кА/м².

По результатам эксперимента сравнивали данные рентгеноструктурного и рентгенофазового анализов образцов. В обогащенном диатомите (по сравнению с исходным) с увеличением плотности тока увеличивается содержание кварца (на 50 %), К₂О (в 2 раза), Na₂O (в 3 раза), уменьшается содержание трехслойных глинистых минералов (на 25 %), Al₂O₃, CaO. Практически не меняется содержание SiO₂, TiO₂. До и после эксперимента осталось в пределах погрешности измерений содержание двухслойных глинистых минералов (каолинит + галуазит + гидрослюда), четырехслойных глинистых минералов (хлорит железа + шамозит), гематита (α -Fe₂O₃), кальцита, доломита, анкерита, анатаза и рутила.

Варьирование концентрации триполифосфата натрия практически не влияет на качественный и количественный фазовый состав диатомита, изменяется только содержание P₂O₅ пропорционально внесенной концентрации триполифосфатата натрия. Полученные результаты показали принципиальную возможность обогащения диатомита таким способом, и необходимость дальнейших исследований условий электрофоретического обогащения диатомита.

Трехмерное картографирование рефлексов рентгеновской и электронной дифракции в исследовании эпитаксиальных наностроек кобальта на подложке кремния

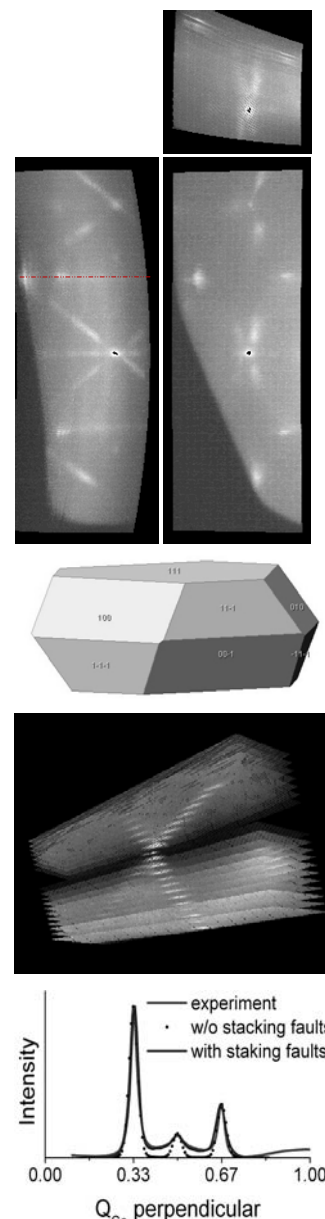
*А.М. Коровин, С.М. Сутурин, В.В. Федоров, А.А. Ситникова,
А.В. Нащекин, Н.С. Соколов*

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Исследования самоорганизующихся массивов магнитных частиц в последнее время заслуживает все больший интерес в связи с потребностями в разработке магнитных носителей сверхвысокой плотности. В настоящей работе исследовались наноразмерные островки кобальта, выращенные эпитаксиально на подложке Si с буферным слоем CaF₂.

Для изучения структуры островков применялись методы дифракции быстрых электронов (ДБЭ) и рентгеновских лучей. На картинах дифракции быстрых электронов (ДБЭ) от островков наблюдается необычное расщепление Брэгговских рефлексов. Для более наглядной интерпретации картин ДБЭ был разработан метод построения трехмерных карт распределения интенсивности в обратном пространстве. Суть данного метода заключается в сборке в единую трехмерную карту распределения интенсивности последовательности картин ДБЭ снятых при изменении угла падения пучка электронов. Также возможно построение сечений либо проекций на заданные плоскости в обратном пространстве. В результате применения данного метода к дифракции от островков кобальта были обнаружены длинные тяжи в направлениях $\langle 111 \rangle$. Такого рода тяжи обычно связаны с наличием дефектов упаковки в структуре.

Для проведения количественного анализа, также были измерены 3D карты интенсивности вокруг отдельных рефлексов с помощью поверхностно чувствительной рентгеновской дифракции на станции BL3A синхротронного источника Photon Factory. 3D карты обратного пространства, полученные в ходе эксперимента по дифракции рентгеновского излучения, полностью соответствуют картам, реконструированным из картин ДБЭ. Моделирование профиля интенсивности вдоль тяжа позволяет оценить распределение дефектов упаковки вдоль направлений $\{111\}$.



Применение химических сдвигов рентгеновских эмиссионных спектров к определению состояния атома в соединении

Ю.В. Ломачук¹, А.В. Титов¹

¹*Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

Энергию рентгеновского перехода какого-либо атома можно представить в виде суммы двух величин. Большая из них определяется зарядом ядра атома, а также взаимодействием осуществляющего переход электрона с другими внутренними электронами данного атома. Меньшая зависит от его химического окружения. По разнице энергий одних и тех же переходов в различных соединениях рассматриваемого атома, т.е. «химсдвигах», можно судить о его состоянии в этих соединениях. Особенность (трудность) задачи вычисления химсдвигов состоит в том, что, с одной стороны, для тяжелых атомов необходим учет релятивистских эффектов в основной области, а с другой – рассмотрение большого числа электронов. Эффективный метод расчета химсдвигов предложен в [1].

С использованием свойства пропорциональности валентных спинов [2] в атомных остовах, в данной работе вводится понятие «приведенных заселенностей»; показывается зависимость химсдвигов с высокой точностью только от их значений. Приведены результаты расчетов химсдвигов K_{α} -, K_{β} -линий возбужденных и ионных состояний атомов Cu, Zn, Ga и Ge. Показано, что величина химсдвига определяется не распределением электронной плотности в валентной области рассматриваемого атома в молекуле, а именно значениями приведенных заселенностей валентных электронных состояний восточной области. Работа поддержана грантом РФФИ №13-03-01307а.

1. Ю.В. Ломачук, А.В. Титов, Препринт ПИЯФ. №2890

2. A.V. Titov, N.S. Mosyagin, Int. J. Quantum Chem., 71, 359 (1999).

Многолинзовый рентгеновский интерферометр, основанный на планарной преломляющей оптике

*M. Lyubomirskiy¹, I. Snigireva¹, V. Kohn³, S. Kuznetsov², V. Yunkin², P. Ershov¹
A. Snigirev¹*

¹ *Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция*

² *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

³ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Недавно был предложен двухлинзовый интерферометр, основанный на планарной преломляющей оптике [1]. Он содержит набор двух идентичных параллельных планарных линз, расположенных друг от друга на дистанции меньшей, чем длина когерентности первичного рентгеновского пучка. При облучении когерентным излучением происходит генерация периодической интерференционной картины - стоячей волны. Период этой стоячей волны зависит от расстояния наблюдения и варьируется от десятков нанометров до десятков микрон. Для расширения функциональных возможностей этого интерферометра и для увеличения его приёмной апертуры мы предлагаем использовать многолинзовый интерферометр, содержащий более двух «сетов» линз. Увеличение приёмной апертуры до миллиметра позволяет охватить весь ондуляторный пучок по вертикали на типовой станции ESRF. В сравнении с двухлинзовым интерферометром, где механизм формирования волнового фронта довольно прост, многолинзовый формирует более сложную интерференционную картину, которая может описываться в формализме Тальбот изображений.

Целью настоящей работы является изучение оптических свойств нового типа интерферометра в ближнем и дальнем волновом поле. Эксперименты проводились на станциях ID6 и ID 11, ESRF. Энергетический диапазон рентгеновского излучения составлял: 12-64 keV. Для регистрации дробных Тальбот изображений была использована станция ID6. Большая протяженность (~100м.) станции ID 11 позволила зарегистрировать фундаментальные Тальбот изображения. Характерной особенностью данного изображения является воспроизведение проекции источника, что позволяет судить о его эффективном размере или пространственной когерентности рентгеновского пучка. Новый интерферометрический подход расширяет диагностические возможности двухлинзового интерферометра. Многолинзовый интерферометр можно использовать не только для диагностики нанообъектов, но и для диагностики свойств излучения современных синхротронов и лазеров на свободных электронах.

1. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, V. Yunkin, S. Kuznetsov, M. Grigoriev, T. Roth, G. Vaughan, C. Detlefs: X-Ray nanointerferometer based on Si refractive bilenses, Phys. Rev. Letters 103, 064801, 2009.

Применение метода РФА СИ для геохимических исследований донных отложений озер Центральной Азии

Ю.Н. Маркова¹, Е.В. Кербер¹, С.С. Кострова¹, В.В. Максимовская²

¹*Институт геохимии СО РАН им. А.П. Виноградова, Иркутск, Россия*

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

Озера, наряду с другими природными архивами (ледники, древесные кольца и др.), хранят уникальные записи изменения окружающей среды и климатических событий на протяжении всей истории своего существования. В составе озерных отложений отражена динамика поступления вещества в водоем и условия, в которых происходило накопление осадка. Реконструкция обстановок осадконакопления в условиях изменяющегося климата стала одной из актуальных научных проблем нашего времени. Для выявления геохимических индикаторов, а также определения степени антропогенного воздействия, необходима информация об элементном составе анализируемых донных отложений, уровень массовых долей содержания микроэлементов в которых может составлять всего $10^{-4} - 10^{-8} \%$, что требует для их определения применения современных высокочувствительных аналитических методов, среди которых особое место занимает рентгенофлуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения (РФА СИ).

В результате проведенных исследований получены геохимические записи палеоклиматических сигналов в осадках оз. Байкал, Хубсугул и Тельмен, расширен и уточнен ряд индикаторных элементов условий осадконакопления, установленных ранее [1-Гольдберг и др., 2001 и др.], и выделены «элементы-маркеры»: Са, Sr, Br, Ti, характеризующие ледниковые и межледниковые условия осадконакопления. Установленные изменения в элементном составе донных отложений оз. Байкал позднплейстоценового возраста могут быть интерпретированы как отклик на климатические события прошлого. Элементный состав донных отложений залива Провал (оз. Байкал) фиксирует антропогенный вклад в формирование осадочной толщи Усть-Селенгинской впадины, что выражается в повышенном содержании Fe, Ni, Zn, Cu во временном интервале 1940-1990 гг.

Таким образом, исследование донных отложений многоэлементным методом РФА СИ позволяет получить достоверную информацию об элементном составе, которая может быть использована для проведения палеоклиматических реконструкций, а также для выявления антропогенного воздействия на окружающую среду.

1. Гольдберг Е.Л., Федорин М.А. и др. Геология и геофизика. Геохимические индикаторы изменений палеоклимата в осадках озера Байкал. 42, 1-2 (2001).

Влияние линейных и угловых смещений преломляющих линз на параметры фокусировки преломляющей оптической системы

М. Поликарпов¹, М. Любомирский², И. Снигирева², А. Снигирев²

¹ Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия

² Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

Прошло более 15 лет с момента имплементации преломляющих линз для жесткого рентгеновского спектра [1]. За этот период рефракционная оптика, основанная на преломляющих линзах, не только стала стандартным элементом оборудования синхротронных станций, но и шагнула далеко вперед, значительно расширяя возможности современных методов исследования микро- и нано-объектов с использованием синхротронного излучения (нано-интерферометрия, микроскопия высокого разрешения, рентгеновская микроскопия стоячих волн и т.д.). Существенную роль в этом развитии сыграла реализация перестраиваемой оптики - рентгеновских трансфокаторов [2], позволяющих непрерывно изменять фокусное расстояние путем добавления одного или нескольких картриджей с линзами. Ввиду неидеального положения картриджей в трансфокаторе относительно друг друга, могут возникать различного рода линейные и угловые отклонения и возникает вопрос о допустимой величине данных отклонений без заметной потери в параметрах фокусировки.

В данной работе рассматривается влияние угловых и линейных смещений линз в системах параболических преломляющих линз на параметры сфокусированного изображения – интенсивность, размер фокального пятна и его положение на детекторе. Были рассмотрены: смещения двух одиночных линз, отстоящих друг от друга на фиксированное расстояние; смещения двух непрерывно преломляющих рентгеновских линз (системы, состоящие из набора рядом стоящих линз), отстоящих друг от друга на фиксированное расстояние; смещения отдельно взятого набора линз в непрерывно преломляющей системе. Произведен анализ полученных данных и сделаны выводы относительно возможного влияния такого рода отклонений на параметры фокусировки в современных трансфокаторах.

1. Snigirev, A., V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler, 1996: *A compound Refractive Lens for focusing High-Energy X-rays*. Nature, **384**, 49-51.
2. Snigirev, A., Snigireva, I., Vaughan, G., Wright, J., Rossat, M., Bytchkov, A. & Curfs, C. (2009). J. Phys. Conf. Ser. **186**, 012073.

Симметрия монокристаллов лопарита-(Ce)

Е.А. Попова^{1,2,3}, С.Г. Лушников³, С.В. Кривовичев², А. Zheludev¹

¹*ETH Zurich, Switzerland*

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

³*ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Лопарит-Ce (Ce,Ca,Na,M)(Ti,Nb)O₃ (где M = Sr,TR,Th и т.д.) - природный минерал из группы перовскита с общей формулой ABO₃. В земной коре минералы данной группы являются аксессуарными, тогда как вещество нижней мантии под высоким давлением преобразуется в основном в минералы со структурой перовскита. Поэтому исследования симметрии монокристаллов в комплексных соединениях из группы перовскита необходимы для понимания структурных трансформаций в глубине Земли.

Несмотря на то, что лопарит-Ce был впервые обнаружен в 1890 году, структура этого минерала до сих пор является предметом дискуссий: в литературе обсуждаются кубические, тетрагональные, ромбические и др. модификации, различающиеся между собой незначительными отклонениями от идеальной кубической структуры перовскита [1]. Небольшие искажения не всегда могут быть выявлены с помощью рентгеновской дифракции, тогда как рамановское рассеяние света, чувствительное к изменению в локальной симметрии, в совокупности с теоретико-групповым анализом (ТГА) позволяет уточнить симметрию минерала.

В данной работе представлены результаты исследований кристаллической структуры монокристаллов лопарита из Хибинского массива Кольского полуострова с помощью рентгеноструктурного анализа, а также рамановского рассеяния света. Полученные поляризованные спектры рассеяния света анализировались в рамках ТГА.

Рентгеноструктурные эксперименты выполнены на монокристалльном дифрактометре Bruker SMART APEX II [2]. Расшифровка и уточнение структуры выполнены в программе SHELXL-97 [3]. Эксперименты по рассеянию света проводились на тройном монохроматоре Trivista 557 с твердотельным лазером с длиной волны 532 нм в 180⁰-градусной геометрии. Оптическая схема была дополнена микроскопом, который позволял фокусировать луч в точку порядка 1 мкм.

Анализ полученных результатов позволил выбрать тетрагональную симметрию для данных монокристаллов лопарита.

1. Mitchell R.H. Perovskites: Modern and Ancient. Thunder Bay: Almaz Press Inc., 2002,318p.
2. Bruker (2009). APEX II, SAINT. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.
3. SHELXL-97, Sheldrick, G.M., University of Goettingen, Germany, 1997

Взаимосвязь ориентации каналов в пористых плёнках анодного оксида алюминия с микроструктурой металла

*И.В. Росляков¹, К.С. Напольский¹, А.В. Забелин²,
Е.В. Яковенко², А.А. Елисеев¹*

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Самоорганизация пористой структуры анодного оксида алюминия (АОА) в периодическую гексагональную упаковку открывает новые возможности использования данного материала в качестве основы для создания устройств хранения информации, калибровочных решеток, высокоразрешающих позиционно чувствительных детекторов и двумерных фотонных кристаллов. Однако следует подчеркнуть, что движущая сила и механизм процесса упорядочения до сих пор до конца не ясны и остаются предметом дискуссий международного научного сообщества.

Ранее было показано, что малоугловое рассеяние рентгеновского излучения (SAXS) и нейтронов (SANS) являются перспективными методами для исследования структуры АОА [1-3]. В ходе настоящей работы с помощью техники SAXS показано существование корреляции между микроструктурой алюминиевой подложки и ориентацией каналов в пористых пленках АОА.

Эксперименты по малоугловому рассеянию были выполнены в Курчатовском центре синхротронного излучения на линии K1.3a D1CSI (длина волны 1,61 Å, размер пучка на образце 0,5×0,5 мм²) в геометрии на пропускание. Дифракционные картины фиксировали с помощью двумерного CCD-детектора (разрешение 2048×2048 пикселей), установленного на расстоянии 2,5 м от образца. Для анализа пористой структуры на различных зернах алюминиевой подложки использовали процедуру картирования.

Наблюдаемые картины малоуглового рассеяния оказываются чрезвычайно чувствительны к ориентации образца. Поворот пористой структуры даже на угол ~ 0,1° вокруг осей, перпендикулярных прямому пучку, приводит к значительному изменению получаемого изображения. Данная особенность позволила установить зависимость направления роста каналов АОА от микроструктуры алюминия: оно остается постоянным (± 0,2°) внутри одного зерна и резко меняется на 1÷2 градуса при переходе через межзеренную границу. Корреляционная длина вдоль направления прямого пучка составляет ~ 10 мкм и остается постоянной по всему образцу.

1. K. S. Napolskii, I. V. Roslyakov, et al., J. Appl. Cryst., 43, 531-538 (2010).
2. S. V. Grigoriev, A. V. Syromyatnikov, et.al., Phys. Rev. B, 81, 125405, (2010).
3. K. S. Napolskii, I. V. Roslyakov, et al., J. Phys. Chem. C, 115, 23726-23731 (2011).

Влияние добавки железа на изменение фазового состава полтитаната калия в процессе термообработки

С.И. Саунина¹, Е.В. Третьяченко², А.В. Гороховский²

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

²Саратовский государственный технический университет, Саратов, Россия

Методом рентгеноструктурного анализа изучено влияние добавки $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ на фазовый состав протонированного полтитаната калия, обработанного в течение 2 часов при температурах 650, 850 и 1100°C.

На рентгенограмме исходного образца, не содержащего добавку $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, наблюдаются широкие дифракционные максимумы в области углов $2\theta \sim 30$ и ~ 48 градусов, которые, по-видимому, формируются путем наложения интенсивных максимумов нанодисперсного $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ и $\text{K}_{1.35}\text{Ti}_8\text{O}_{16}$. Также на рентгенограмме присутствуют дифракционные линии рутила. Размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) титанатов калия ~ 1 нм, а диоксида титана ~ 40 нм. Исходные образцы, содержащие добавку $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ в количестве 1 и 6,5 масс.% представлены фазами TiO_2 модификации рутил и нанодисперсными $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ и $\text{K}_{1.35}\text{Ti}_8\text{O}_{16}$.

После термообработки при 650°C в образце, не содержащем добавку, появляется новая фаза анатаз, размеры ОКР ~ 20 нм. При этом количество нанодисперсных фаз $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$, $\text{K}_{1.35}\text{Ti}_8\text{O}_{16}$ уменьшается и формируются достаточно крупные (~ 100 нм) кристаллы $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$. В образцах, содержащих добавку $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ в количестве 1 и 6,5 масс.%, крупные кристаллы $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ не образуются.

Дальнейшее повышение температуры обработки образца до 850°C, не содержащего добавку $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, не приводит к существенному изменению фазового состава. Однако средние размеры кристаллов $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$, формирующихся при этой температуре, оказались в ~ 2 раза меньше, в то же время размеры кристаллов анатаза увеличились во столько же раз. Количество фазы рутил и средние размеры кристаллов остались такими же, как в образце, прошедшем термообработку при 650°C.

В образце после термообработки при 850°C в присутствии добавки 1 масс.% $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ обнаруживаются фазы рутил, $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$, $\text{K}_{1.35}\text{Ti}_8\text{O}_{16}$, а также анатаз, количество которого существенно увеличивается. После аналогичной термообработки образца, содержащего 6,5 масс.% $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, на рентгенограммах дифракционные максимумы, характерные фазам титанатов калия, не обнаруживаются. При этом количество фазы рутил возрастает, а анатаза уменьшается. После термообработки при 1100°C в образце, не содержащем добавку $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, присутствуют фазы рутил и $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$. Увеличение содержания добавки $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ до 6,5 масс.% обуславливает формирование в образце только кристаллов рутила.

Исследование ансамблей самоорганизующихся монослоёв магнитных наночастиц на жидкой поверхности при помощи рассеяния синхротронного излучения

В.А. Уклеев¹, А.А. Воробьёв², А. Хассанов³, О. Коновалов⁴, С.В. Григорьев¹

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

² *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

³ *Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany*

⁴ *Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция*

В связи с техническим прогрессом современного общества в последние годы отмечается возрастание интереса к новым материалам с передовыми физическими свойствами, которые должны обеспечить дальнейший прогресс наноэлектроники, спинтроники, фотоники. Важными объектами исследования в этой области являются системы, склонные к самоорганизации и самосборке. В этом контексте монослои однодоменных магнитных наночастиц представляют значительный интерес как с точки зрения возможных приложений, так и для фундаментальной теории взаимодействия и самоорганизации нанообъектов.

В представленной работе были исследованы моно- и бидисперсные ансамбли магнитных наночастиц на поверхности воды в процессе самоорганизации. Для проведения подобного исследования была использована уникальная комбинация экспериментальных методов: рефлектометрии синхротронного излучения (XRR) и малоуглового рассеяния в скользящей геометрии (GISAXS), что позволило изучить распределение электронной плотности в монослое наночастиц как по глубине, так и в плоскости поверхности. Раствор, содержащий магнитные наночастицы осаждался на поверхность воды в лэнгмюровской ванне, после чего проводилось изотермическое сжатие, в процессе которого происходил рост однородного монослоя.

Эксперимент проводился на линии ID10 Европейского Центра Синхротронных Исследований (ESRF, Grenoble, France). Карта малоуглового рассеяния в скользящей геометрии от ансамбля наночастиц Fe₃O₄ диаметром 10 нм, снятая при угле падения синхротронного излучения $\alpha_i = 0.2^\circ$ и давлении в слое $P = 5$ мН/м представлена на Рис. 1а. На Рис. 1б показана соответствующая кривая зеркального отражения синхротронного излучения. Теоретическая модель, описывающая кривую отражения представлена на вставке Рис. 1б. Результаты GISAXS и XRR подтверждают устойчивое и воспроизводимое формирование монослоя с гексагональной упаковкой частиц при давлении в слое порядка 5-10 мН/м.

Исследование эффекта обменного взаимодействия в гетероструктурах Co/MnF₂ методом рентгеновского магнитно-циркулярного дихроизма

В.В. Федоров, С.М. Сутурин, Д.А. Баранов, К.В. Кошмак, А.Г. Банщиков, Н.С. Соколов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Гетероструктуры на основе магнитных материалов в настоящее время нашли широкое применение в приборах на основе спиновых клапанов. Свойства подобных структур во многом определяются межслоевым обменным взаимодействием и такими связанными с ним явлениями, как эффект магнитной близости или наблюдаемый в гетероструктурах ферромагнетик (ФМ)/антиферромагнетик (АФМ) эффект обменного смещения [1]. Хотя эти эффекты были обнаружены довольно давно, их природа на микроскопическом уровне по-прежнему не достаточно ясна [1], что обуславливает интерес к изучению “модельных” гетероструктур ФМ/АФМ, таких как Co/MnF₂.

Гетероструктуры Co/MnF₂ были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Слой Co, образованный островками с размерами менее 10 нм ($d \approx h$), был выращен на поверхности гладкого ($\Delta h \approx 1$ нм) слоя MnF₂ с метастабильной орторомбической структурой. На Рис. 1 представлены элементо-селективные кривые намагниченности для Co и Mn, полученные методом рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма (XMCD, X-ray magnetic circular dichroism) вблизи L₃ края поглощения. Было установлено, что в результате обменного взаимодействия между слоями ФМ и АФМ, магнитные моменты ионов Mn²⁺, находящиеся на интерфейсе с кобальтом, выстраиваются антипараллельно магнитным моментам ферромагнетика. Несмотря на установление антиферромагнитного порядка в MnF₂ ($T_{\text{Neel}}=67.2$ К) при охлаждении структуры, доля упорядоченных ионов Mn²⁺ увеличивается от ~0.5 монослоя при 300К до ~1.5 монослоев при 14К. При охлаждении гетероструктур в магнитном поле ниже температуры Нееля MnF₂ был обнаружен сдвиг кривых гистерезиса (Рис.1б), в противоположную к направлению поля заморозки сторону, так называемый эффект отрицательного обменного смещения.

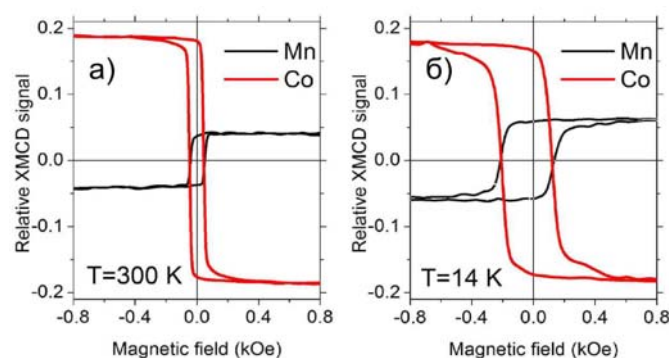


Рис.1 Кривые намагниченности кобальта (красная кривая) и марганца (черная кривая), полученные с помощью метода XMCD для температур 300 К и 14 К. (BL25SU, SPring-8)

1. M. Kiwi, Exchange bias theory. Journal of Magnetism and Magnetic Materials **234** (2001) 584–595

Исследование методом малоуглового синхротронного излучения наночастиц предназначенных для адресной доставки лекарств. Внутренняя структура и функциональность.

С.К. Филиппов¹, П. Хитил¹, П. Конарев², К.М. Пападакис³, А. Жигунов¹,
Й. Пештил¹, П. Штепанек¹, Т. Этрих¹, К. Ульбрих¹, Д. Свергун²

¹ *Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic*

² *EMBL, DESY, Гамбург, Германия*

³ *Технический Университет Мюнхена, Гархинг, Германия*

В работе сообщается об исследовании внутренней структуры наночастиц, которые являются эффективными носителями для адресной доставки лекарств. Химическая структура исследованных конъюгатов представляет собой макромолекулу на базе *N*-(2-гидроксипропил) метакриламида (ГПМА), который ковалентно связан рН чувствительной связью с противораковым препаратом доксорубицин и определенным количеством холестерина. Исследования разбавленных растворов конъюгатов в фосфатном буфере 5.0 and 7.4, проведенные методом малоуглового рассеяния синхротронного излучения, а также флуоресцентной корреляционной спектроскопии и рассеяния света подтверждают формирование наночастиц при концентрации выше критической. Было установлено, что содержание любого количества холестерина приводит к формированию анизотропных наночастиц [1]. Результаты показывают, что размер, анизотропия и число агрегации наночастиц растут с увеличением количества холестериновых фрагментов в макромолекуле. Эксперименты с малоугловым рассеянием синхротронного излучения позволили определить трехмерную структуру наночастиц собранных из конъюгатов ГПМА и холестерина. Используя *ab-initio* вычисления было показано, что наиболее вероятной структурой наночастиц является структура ожерелья в которой эллипсоидные кластеры составлены, в основном, из холестерина покрытого опушкой из ГПМА. Сами кластеры соединены перемычками образованными гидрофильными ГПМА цепочками. Используя сочетание разных методов было доказано, что доксорубицин не находится исключительно внутри холестериновых кластеров (как предполагалось раньше), а равномерно распределен по всей наночастице включая гидрофильную опушку составленную из ГПМА [1]. Такая структура, по нашему мнению, является одной из причин высокой противораковой эффективности исследованных конъюгатов.

1. S. ВК. Filippov, .P. Chytil, et al., *Biomacromolecules* 13, 2594-2604 (2012).

Исследование влияния фотокаталитических добавок на мезоструктуру биоактивных покрытий для защиты каменных памятников культурного наследия

Т.В. Хамова¹, О.А. Шилова¹, Г.П. Котица², В. Angelov³, А. Жигунов³

¹ *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

³ *Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic*

В последнее время из-за ухудшения экологической обстановки в промышленных городах процессы биоразрушений каменных памятников заметно ускорились и приняли новые формы. В этой ситуации создание новых материалов для защиты каменных поверхностей от воздействия микроорганизмов-биодеструкторов является одной из важных научных и практических задач.

Одной из перспективных технологий получения биозащитных материалов является золь-гель технология, которая обеспечивает введение и равномерное распределение биологически активных субстанций в неорганических или органо-неорганических матрицах и фиксацию последних на поверхностях в виде покрытий. В качестве таких субстанций широко применяются биоциды – различные неорганические или органические соединения (кремнийорганические, титанорганические, фенольные соединения и другие). Фотокатализаторы, например, диоксид титана и фотосенс, также представляются перспективными для применения в качестве биоцидов. Их введение в состав покрытия усилит антимикробные свойства, в силу происходящих фотокаталитических реакций под действием ультрафиолетового света. В результате происходит образование активных форм кислорода (озон и синглетный кислород), которые оказывают энергетическое воздействие на клетку простейших микроорганизмов, подавляющее их жизнедеятельность.

В настоящей работе методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) была исследована мезоструктура биоактивных покрытий, формируемых на основе эпоксидно-силоксановых зольей, модифицированных диоксидом титана и фотосенсом. Измерения МУРР были проведены в диапазоне переданных импульсов $4.5 \cdot 10^{-2} < q < 11 \text{ нм}^{-1}$.

Анализ данных МУРР показал, что процессы агрегации в данных зольях происходят с образованием двухуровневой фрактальной структуры с последовательностью уровней: первичные частицы с сильно развитой фрактальной поверхностью (1-й уровень) – массово-фрактальные кластеры (2-й уровень). Установлено, что введение в эпоксидно-силоксановые покрытия незначительных добавок диоксида титана и фотосенса, влияет как на размерности поверхностного D_s и массового D_m фракталов, так и на границы их самоподобия.

Работа выполнена при поддержке программ Президиума РАН № 24 и ОХНМ-02.

Корреляция слоев упаковки опалоподобных структур

*А.В. Чумакова¹, А.А. Мистонов², Н.А. Григорьева², К.С. Напольский³,
Н.В. Саполетова³, А.А. Елисеев³, А. Петухов⁴, С.В. Григорьев^{1,2}*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

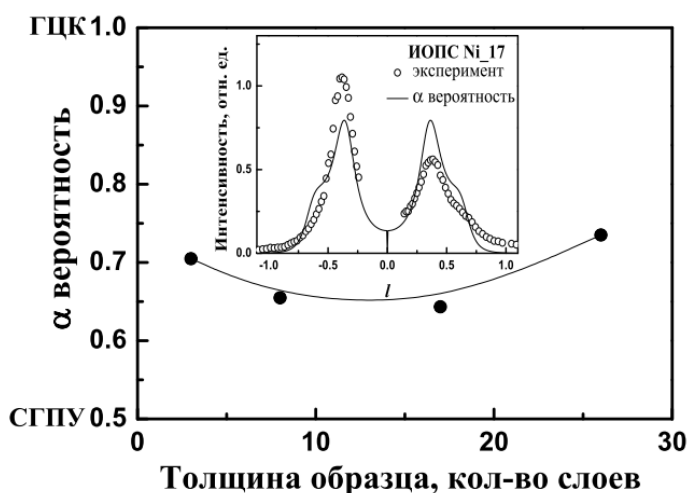
²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴Debye Institute, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands

В работе представлены результаты исследования зависимости параметра корреляции слоистой упаковки от толщины пленки инвертированных опалоподобных структур (ИОПС). Пленки ИОПС были исследованы методом ультра-малоугловой дифракции синхротронного излучения на установке DUBBLE в ESRF. Образцы представляли собой металлический каркас взаимосвязанных квазитетраэдрических и квазиоктаэдрических элементов на основе никеля толщиной 4, 7, 17 и 26 слоев сферических пор матрицы [1].

Параметр корреляции слоистой упаковки, α , определяет вероятность



того, что три идущие подряд слоя занимают различные положения, обозначаемые как А, В и С. При $\alpha=1$ слои упакованы в идеальную ГЦК структуру с мотивом АВС, а при $\alpha=0$ сформирована ГПУ с мотивом АВ. Согласно теории Вильсона [2], в реальных кристаллах параметр α может принимать значения от 0 до 1. Аппроксимация экспериментальных данных проводилась в

рамках модели Вильсона с учетом конечного числа слоев. На рисунке показаны результаты аппроксимации данных серии ИОПС различной толщины. На вставке рисунка представлены экспериментальная кривая интенсивности вдоль брегговского стержня и расчетная кривая, полученная в результате аппроксимации. Видно, что образцы имеют преимущественно ГЦК структуру и с увеличением толщины образца вероятность образования ГЦК не меняется.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты № (12-02-31143, 10-02-00634-а).

1. K.S.Napolskii et al., J.Langmuir.-2010.-Vol.26(4),-Pp.2346-2351

2. A.J.C. Wilson. Acta Crystallographica.-1949.-Vol.2,№ 5-Pp. 318-321

**Комплексное исследование материалов с применением
рентгенодифракционных и рентгеноабсорбционных методов:
аппаратура, методики, практика**

*М.Д. Шарков¹, А.В. Бобыль¹, М.Е. Бойко¹, А.М. Бойко¹, Я.В. Зубавичус²,
С.Н. Ивашевская³, С.Г. Конников¹*

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³ Институт геологии Карельского НЦ РАН, Петрозаводск, Россия

Разработан лабораторный прибор, позволяющий проводить рентгенодифракционные и рентгеноабсорбционные эксперименты с использованием излучения одного источника, как одновременно, так и последовательно. Описаны алгоритмы комплексной методики исследования материалов с применением рентгеновского излучения на основе таких методов анализа, как МУРР (малоугловое рассеяние рентгеновских лучей), РД (рентгеновская дифрактометрия), XAFS (X-Ray Absorption Fine Structure), а также АМУРР (аномальное МУРР). Приведена оригинальная методика анализа EXAFS [1] и усовершенствованная методика анализа МУРР, содержащая процедуру Фурье-фильтрации брэгговских пиков.

Проведен анализ двух образцов фосфата лития-железа LiFePO_4 , полученных химическим путем, методами РД и EXAFS. Показано, что образцы могут содержать до 10% объемной доли фосфата железа-III FePO_4 , а формирующиеся в образцах шпинельные ферромагнитные фазы обладают структурой маггемита $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$.

Два образца алмазной шихты (первичного продукта детонационного синтеза ультрадисперсных алмазов) проанализированы с помощью методик РД и МУРР. Определено присутствие в образцах ультрадисперсного алмаза (УДА) как алмазных, так и графитных составляющих, а также низкоразмерных структурных компонент; кроме того, получен набор межплоскостных расстояний от 6 до 15 нм. Эти результаты согласуются с гипотезой о покрытии зерен УДА оболочкой наподобие луковой шелухи.

Образец полупроводникового соединения $\text{GaAs}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ исследован методом аномального МУРР, т.е. были проанализированы данные МУРР, полученные при монохроматических анализирующих пучках с длинами волн, незначительно отличающимися от величин краев поглощения элементов соединения: As К- и Se К-края. Показано, что сверхструктурные компоненты GaAs характеризуются пространственным параметром (толщина слоя, межплоскостное расстояние сверхрешетки, размер доменов в регулярной доменной сетке) около 25 нм, а компоненты GaSe – параметром около 15 нм.

1. М.Д. Шарков, К.Ю. Погребницкий, М.Е. Бойко, ЖТФ 81 (9), 134 (2011).

Исследование температурной динамики фазового состава тонкопленочных сплавов Ni-Mn-In с помощью рентгеновской дифрактометрии

А.И. Юшков¹, А.И. Грунин¹, П.А. Ершов¹, А.Ю. Гойхман¹

¹ *Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград, Россия*

За последние десятилетия было проведено множество температурных рентгенодифракционных исследований сплавов Гейслера для выяснения динамики поведения их кристаллической решетки [1]. Исследованиям подвергались в основном объемные образцы, при этом применялись различные методики изменения температуры материалов.

В настоящей работе представлены результаты исследований тонкопленочного сплава Гейслера Ni-Mn-In, выращенного методом импульсно-лазерного со-осаждения мишеней Ni Mn и In на подложке Si (100) в условиях сверхвысокого вакуума (10^{-7} Pa) [2]. Полученные образцы были исследованы методом рентгеновской дифрактометрии на приборе Bruker Discover D8 с применением температурной камеры DSC350, которая позволяет изменять температуру образца в диапазоне от -100°C до 350°C .

Исследования температурной динамики фазового состава проводились путем изменения температуры образцов с шагом от 10°C до 30°C в диапазоне температур от -90°C до 350°C , и последовательной регистрации дифракционной картины в области пика аустенитной фазы сплава Ni-Mn-In (220) в режиме сканирования θ - 2θ .

Таким образом, результатом работы является методика экспресс-контроля фазового состава и термодинамических свойств формируемых тонкопленочных образцов сплавов гейслера Ni-Mn-In, с точки зрения их применимости для наблюдения магнетокалорического эффекта.

В дальнейшем наши исследования будут направлены на определение оптимальных условий для формирования сплава с наибольшим значением магнетокалорического эффекта, а также на прецизионное исследование динамики решетки путем компьютерного моделирования и температурной дифрактометрии на источниках синхротронного излучения.

1. Balke, B., Fecher, G. H., and Felser, C.: Temperature dependent XRD Investigations on Heusler Compounds, LNLS 2006 Activity Report.
2. А. И. Грунин, А. Ю. Гойхман, В. В. Родионова, Н. Н. Шушарина., Перспективные Материалы. №4, 77 (2012)

Рост, структура и магнитные свойства мультислойных наносистем Fe/MgO/Fe

*Е.М. Якунина¹, В.И. Боднарчук², В.В. Проглядо¹, Е.А. Кравцов¹,
М.В. Рябухина¹, В.В. Устинов¹*

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Мультислойные наносистемы Fe/MgO/Fe, благодаря наблюдаемому в них эффекту туннельного магнетосопротивления (ТМС), представляют большой технологический интерес в качестве элементов устройств наноспинтроники. В настоящей работе мы сообщаем о зависимости структурных и магнитных свойств системы Fe/MgO/Fe от толщины диэлектрической прослойки MgO.

Методом высоковакуумного магнетронного распыления была получена серия образцов (001)MgO//Fe(200Å)/MgO(tÅ)/Fe(50Å)/Ta(50Å). Толщина туннельного барьера MgO менялась в диапазоне $t=10-30$ Å. В процессе роста структуры отжигались при температурах 300-500°C. Структурные исследования, проведённые с помощью рентгеновской дифрактометрии, подтвердили формирование совершенной слоистой структуры, а также кристаллической структуры (001) в слоях Fe. Из анализа магнитометрических данных установлено, что слои Fe перемагничиваются в разных полях. На рисунке 1 приведен пример малоуглового рентгеновского спектра и петли гистерезиса для образца с толщиной слоя MgO $t=15$ Å. Таким образом, в системе должно наблюдаться гигантское туннельное магнетосопротивление в интервале полей от 20 до 40 Э. Вывод о неодновременном перемагничивании слоев Fe подтверждается результатами поляризационной нейтронной рефлектометрии (REFLEX-P на реакторе ИБР-2).

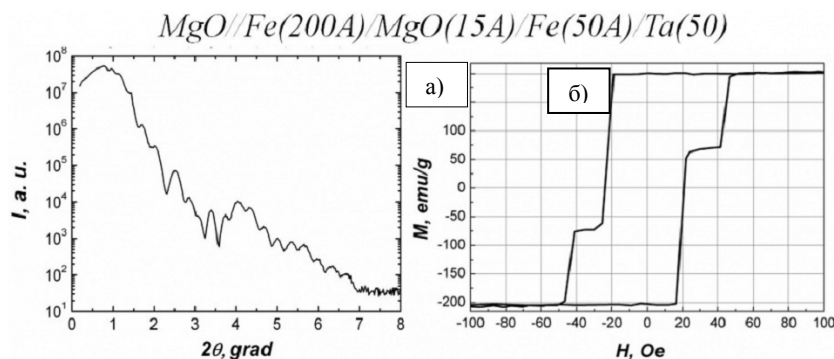


Рисунок 1. а) Рефлектометрический спектр и б) петля гистерезиса многослойной системы Fe/MgO/Fe с толщиной прослойки MgO 15 Å,

Работа выполнена при частичной поддержке УрО РАН (программа ОФН РАН «Спиновые явления в твердотельных наноструктурах и спинтроника», проект №12-Т-2-1011), Минобрнауки РФ (проект № 8682), РФФИ (грант № 12-02-12054-офи-м, проект № 12-02-31563-мол_a) и НШ-6172.2012.2.

Секция « Материалы и минералы »

Фазообразование при синтезе и спекании твёрдых растворов бинарной системы $\text{NaNbO}_3\text{-CuNb}_2\text{O}_6$.

А.Г. Абубакаров

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

Так как основным источником загрязнения окружающей среды при производстве сегнетопьезоматериалов, СПКМ, является свинец, входящий в их состав как основной компонент (его массовая доля превышает 50 %), всё внимание материаловедов сфокусировалось на бессвинцовых СПКМ, количество которых ограничено. Одной из наиболее перспективных групп материалов, активно изучаемых в последние годы, являются многокомпонентные твёрдые растворы, ТР, на основе ниобатов щелочных металлов, НЦМ, с участием оксидных соединений меди [1-3]. При этом наиболее многообещающие результаты: механическая добротность, Q_m , > 1000 и коэффициент электромеханической связи, K_p , > 0,42, позволяющие использовать эти материалы в генераторах ультразвука (медицина: ультразвуковые терапевтические системы, пластическая хирургия, протезирование) и бытовой технике; - получены при использовании двойного ниобата меди, CuNb_2O_6 .

В ходе работы установлено, что Nb_2O_5 квалификации «Нбо-пт» является более эффективным реагентом для синтеза двойного ниобата меди, чем Nb_2O_5 квалификации «о.с.ч.». Это связано с большим содержанием специфических примесей в техническом сырье, по-видимому, увеличивающих концентрацию дефектов, выполняющих транспортную функцию при синтезе, что приводит к существенному возрастанию скорости гетерогенной реакции, её полноте и практической завершённости уже при однократном обжиге. Определены оптимальные температуры синтеза ТР бинарной системы $(1-x)\text{NaNbO}_3 - x/2\text{CuNb}_2\text{O}_6$, лежащие в интервале $T_{\text{синт.}} = (750 - 1050) \text{ }^\circ\text{C}$. Показано, что спекание керамик проходит при непосредственном влиянии Cu -содержащих жидких фаз, а характер их воздействия зависит от квалификации используемого Nb_2O_5 и приводит в случае технического реактива (марки «Нбо-пт») к реализации плотных и механически прочных керамических спёков, а в случае особочистого («о.с.ч.») - к частому растрескиванию и механическому разрушению поликристаллических материалов.

1. E. Cross, NATURE..432. 4. 24-25. (2004).
2. Y. Ming-Ru, C. Sheng-Yuan, et al., Journal of Applied Physics. 044503. 110. (2011).
3. Y. Ming-Ru, C. Sheng-Yuan, et al., Journal of Alloys and Compounds. 433. 507. (2010).

Синтез наночастиц кремния в плазме барьерного электрического разряда

В.В. Андреев, Л.А. Васильева

Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

Исследованию барьерного разряда в настоящее время уделяется существенное внимание, так как на его основе сравнительно легко реализовать не только химический синтез в промышленных масштабах, но и синтез наночастиц различных элементов. Кроме того, в последнее время значительно возрос интерес к исследованию поверхностного барьерного разряда [1]. Это связано не только с работами по совершенствованию плазмохимических реакторов, но и дальнейшим развитием различных плазменных и плазмохимических технологий, в том числе, в связи с возможностью использования приповерхностной плазмы для получения поверхностных наноструктур с требуемыми характеристиками и свойствами, в частности материалов с наноструктурированными поверхностями.

В данной работе исследован синтез наночастиц кремния в приповерхностной плазме барьерного разряда. Следует отметить, что эффективность такого синтеза сложным образом зависит от различных внешних факторов: перенапряжения, частоты напряжения, влажности газа и скорости его потока, поверхностной проводимости диэлектрического барьера, его удельной ёмкости. Также существенными параметрами, определяющими плотность вклада энергии в плазмохимический процесс, являются формы и размеры канала микроразряда. Кроме того, наряду с генерацией электронов в барьерном разряде, требуется обеспечить наибольшую область и длительность существования напряженности электрического поля, соответствующей наибольшей эффективности протекания исследуемого процесса [2]. Вопросы формирования приповерхностной плазмы в барьерной разрядной ячейке и создания в ней оптимального электрического режима были исследованы ранее также в работах авторов [3, 4].

Полученные в работе результаты могут служить физической основой для создания не только технологии синтеза наночастиц кремния в приповерхностной плазме барьерного разряда, но и материалов с наноструктурированными поверхностями на основе кремния для разнообразных применений.

1. В.Р. Соловьев и др., Физика плазмы. 34, 7 (2008).
2. М.В. Соколова, Изв. Академии Наук СССР. Энергетика и транспорт. 6 (1983).
3. В.В. Андреев и др. Прикладная физика. 1 (2011).
4. V.V. Andreev et al. Plasma Physics Reports. 37, 13 (2011).

Nanocomposite MnO₂-based catalysts for ORR - crystal shape and doping effects

O.B. Бойцова

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

Nanoparticulate samples of pure and doped beta and gamma MnO₂ conforming to tetragonal pyrolusite and orthorhombic ramsdellite were synthesized by microwave hydrothermal method. The synthesis was based on reaction of potassium permanganate with sodium nitrite at 170°C without any seed or template. The materials have been thoroughly characterized by XRD, SEM and EDS. The as-prepared β-MnO₂ forms nanorods with rectangular cross-section of about 100 nm growing along the c axis for up to 2 μm. Doping with Ni or Co does not change the morphology of the pyrolusite crystals, it leads, however, to the nano-rod aspect ratio. Doping with Fe invariably leads to inversion of the crystal structure from β-MnO₂ (pyrolusite) to γ-MnO₂ (ramsdellite). The morphology simultaneously changes from nanorod to platelet-like shape. All prepared materials retain activity towards oxygen reduction in the alkaline media. The reduction process shows regardless of the crystal structure strong preference for 4 electron reduction pathway. In contrast to previous report the nanorod based catalysts show significantly enhanced activity in the oxygen reduction process. This behavior is attributed to preferential surface of the nanorods which are primarily composed of catalytically active {110} oriented faces.

Нано- и гетероструктуры магнитных полупроводников как основа спиновых наноэлектронных приборов

А.И. Дмитриев

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Настоящая работа направлена на развитие фундаментальных основ создания спиновых наноэлектронных приборов, совместимых с элементной базой современных электронно-оптических приборов, а также на получение принципиально новых экспериментальных результатов о влиянии размеров и размерности на статические и высокочастотные динамические магнитные свойства, спиновую динамику, электронно-транспортные свойства, микроволновое магнетосопротивление и магнитооптику нано- и гетероструктур магнитных полупроводников. В качестве таковых выступают: упорядоченные массивы нанопроволок и тонкие пленки германия Ge, легированного переходными металлами Mn, Cr, Fe, Co, гетероструктуры с квантовыми ямами и ферромагнитными слоями и.

Создаваемые и исследуемые в работе нано- и гетероструктуры магнитных полупроводников являются прототипами наноприборов спинтроники, основанных на размерных спин-зависимых эффектах: магниторезистивной оперативной памяти, спиновых логических вентилях, спиновых транзисторов, спиновых светодиодов и т.д.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-07-31072), а также ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (соглашение № 8755 от 01.10.2012).

Автор выражает благодарность проф. Р. Б. Моргунову за внимание к работе и помощь на всех этапах ее выполнения.

Исследования влияния изоморфного замещения в кристаллах системы $K_3H(SO_4)_2 - (NH_4)_3H(SO_4)_2 - H_2O$

Е.В. Дмитричева, В.В. Гребенев, И.П. Макарова

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Исследуемые кристаллы принадлежат системе $K_3H(SO_4)_2 - (NH_4)_3H(SO_4)_2 - H_2O$, для крайних составов которой характерны суперпротонные фазовые переходы [1], причем кинетика этих переходов принципиально различна [2, 3]. С целью изучения в этой системе влияния изоморфного замещения на кинетику фазовых переходов был получен и исследован ряд монокристаллов $((NH_4)_xK_{1-x})_3H(SO_4)_2$.

Монокристаллические образцы твердых растворов были выращены из стехиометрических водных растворов методом управляемого снижения растворимости. Установлено, что выращенные кристаллы твердых растворов в зависимости от состава исходного раствора имеют различный габитус. Исследования химического состава были проведены на растровом электронно-ионном микроскопе (РЭИМ) Quanta 200 3D методом энергодисперсионного рентгеновского анализа EDXS.

На основании результатов исследований оптических свойств в поляризованном свете при различных температурах установлено, что монокристаллы разбиваются по габитусу на три группы и демонстрируют одинаковые свойства в пределах группы, за исключением составов с $x = 0.1 - 0.3$. Для кристаллов этой группы наблюдаемое температурное поведение в поляризованном свете различно для каждого состава. Для игольчатых кристаллов группы составов с $x = 0.4 - 0.6$ поведение подобно поведению кристаллов $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$. При малых концентрациях ионов калия ($x = 0.7 - 0.9$) образуются кристаллы кубической сингонии, в которых, в отличие от моноклинной фазы чистого $(NH_4)_3H(SO_4)_2$, фазовые переходы не наблюдаются вплоть до температур разложения.

На основании результатов проведенных исследований и сравнении их с литературными данными для незамещенных кристаллов, показано, что замещение аммонием меняет кристаллическую структуру образцов $((NH_4)_xK_{1-x})_3H(SO_4)_2$ и существенным образом меняет температурное поведение кристаллов, вплоть до отсутствия в них фазовых переходов.

Работа выполнена в рамках ведущей научной школы НШ-2883.2012.5.

1. И.П. Макарова, Т.С. Черная, В.В. Гребенев и др., Кристаллография, 2011, т.56. №6, с.1062.
2. A.I. Baranov, V.V. Grebenev, U. Bismaer and J. Ludwig, Ferroelectrics, 2008, v.369, p.108 – 116.
3. R.H. Chen, T.M. Chen, C.S. Shern, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2000, v.61, p.1399–1406.

Углерод-Ме-композитные аноды для рентгеновских трубок

И.Л. Жогин¹, В.И. Кондратьев², А.Н. Шмаков³

¹ НПП «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

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

³ Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

Для области рентгеновского спектра выше 22 кэВ, характеристическое излучение (ХИ) серебра, и ниже 60 кэВ, ХИ вольфрама, единственно доступный источник рентгеновского излучения для лабораторных и промышленных применений это тормозное излучение (ТИ; предпочтителен материал анода с большим атомным номером Z , вольфрам или рений). Для нерелятивистских электронов ионизационные потери, к которым относится ХИ, намного больше тормозных потерь (см. [1]). Поэтому использование ХИ металлов из ряда лантаноидов заметно увеличило бы «рентгеновский КПД» (монохроматичность также важна для технических и медицинских применений). Однако у лантаноидов низка и теплопроводность, и температура плавления [2].

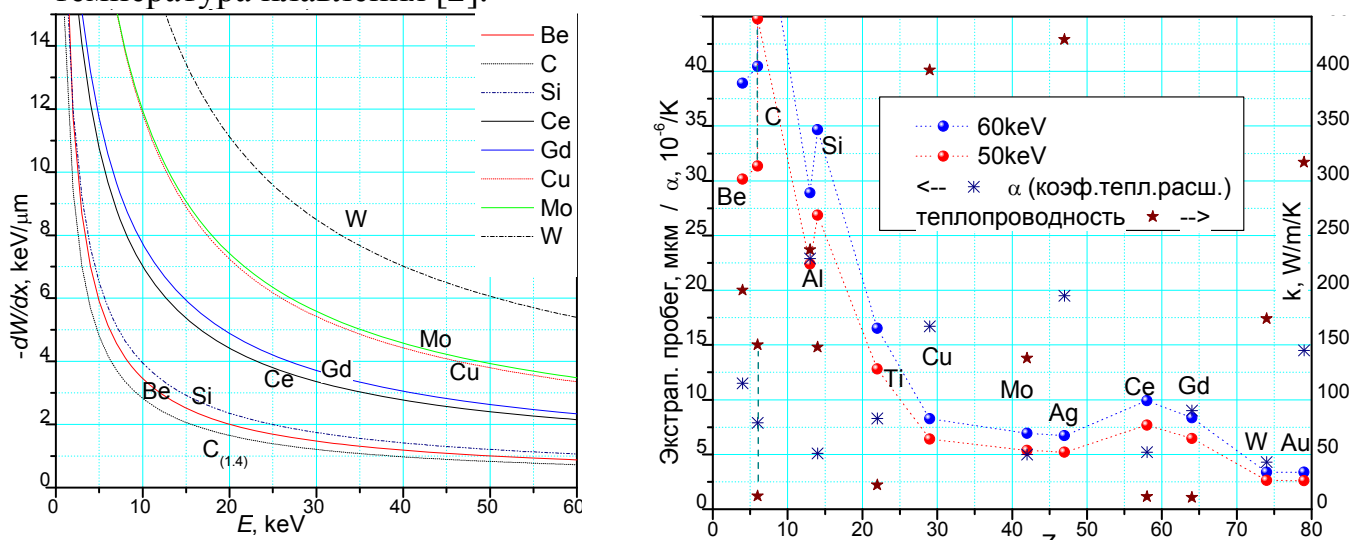


Рис.1: Графики показывают энергетические потери (от энергии) и экстраполированный пробег электронов (для 50 и 60 кэВ) для разных элементов (и их теплопроводность и ТКР).

Углерод отличается разнообразием форм, способных выдерживать высокие температуры (особенно в вакууме): графитовая фольга, силицированный графит, стеклографит; последний, при низкой плотности, ~ 1.2 , вакуумноплотен. Разработка анодов в виде легкой углеродной матрицы с нужной концентрацией внедренных атомов лантаноида (Ce, Pr, Gd) в приповерхностной области ~ 20 мкм, с поверхностной плотностью $\sim 5-10$ мг/см², позволила бы устранить дефицит монохроматичных источников рентгена в области 30-50 кэВ.

1. С. А. Иванов, Г. А. Щукин. Рентгеновские трубки технического назначения. Л.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Е. М. Савицкий, В. Ф. Терехова, И. В. Буров, И. А. Маркова, О. П. Наумкин. Сплавы редкоземельных металлов. Издательство АН СССР, М.: 1962.

Получение декагональных монокристаллов Al-Co-Cu для исследования упругих свойств

М.В. Ключева, М.А. Черников, Д.А. Шулятев, Н.А. Козловская, Е.В. Скачков

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

Интерес к квазикристаллам декагональных систем связан с возможностью изучения свойств в периодическом и аperiodическом направлениях на одном и том же образце.

Измерения упругих свойств декагональных объектов осложнены тем, что для испытаний необходимы достаточно массивные образцы. Методика получения кристаллов такого размера для системы Al-Co-Cu не отработана.

В данной работе были подобраны условия для получения декагональных образцов и получены кристаллы составов $Al_{65}Co_{16}Cu_{19}$ и $Al_{65}Co_{17}Cu_{18}$ (рис. 1) методом спонтанной кристаллизации. Оптимальная скорость роста составила 4-5 град./ч.

Рентгенофазовый анализ подтвердил преобладание в образце декагональной фазы. Из лауэграммы, снятой вдоль главной оси кристалла (рис. 2) видно наличие симметрии десятого порядка.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 11-02-00883-а

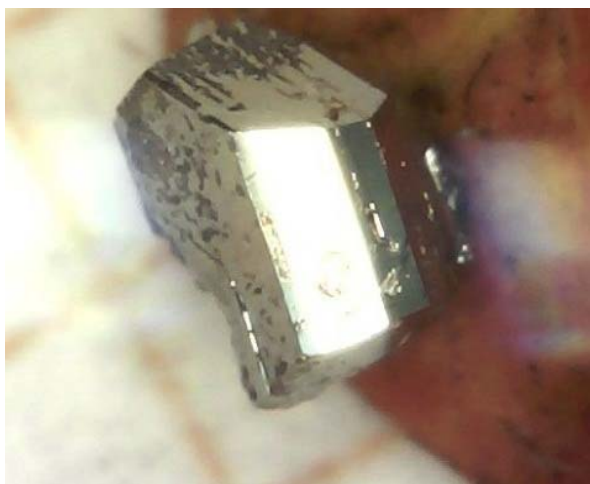


Рис. 1 – Квазикристалл $Al_{65}Co_{17}Cu_{18}$, выращенный методом спонтанной кристаллизации.

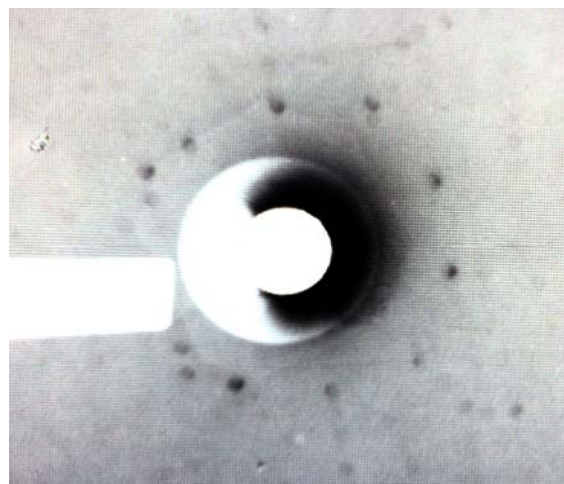


Рис. 2 – Лауэграмма, снятая вдоль периодической оси кристалла.

Магнитокалорический эффект в поликристаллах

А.И. Прошкин¹, М.В. Медведев², Ф.А. Кассан-Оглы¹

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Магнитокалорический эффект (МКЭ) — магнитотепловое явление, возникающее при воздействии магнитного поля на вещество, обладающее магнитными свойствами [1]:

$$\frac{\partial T}{\partial H} = -\frac{T}{C} \left(\frac{\partial S}{\partial H} \right) \quad (1)$$

МКЭ был открыт Емилем Варбургом в 1881 году [2]. Величина МКЭ существенно зависит от свойств каждого материала, а изучение этого эффекта актуально для получения сведений о взаимосвязи магнитных и тепловых характеристик и для конструирования магнитных холодильных установок.

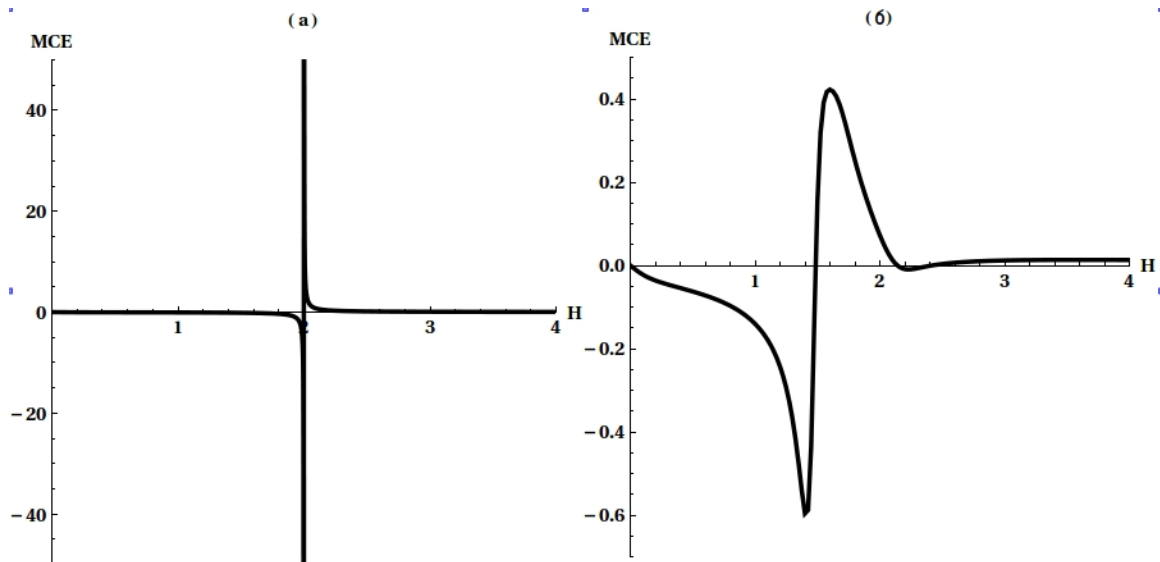


Рис.1. Магнитокалорический эффект в 6-вершинной антиферромагнитной модели Поттса $J=-1$, $T=0.07$, (а) случай монокристалла, (б) случай поликристалла.

В ходе данной работы мы исследовали МКЭ в поликристаллах разных моделей: в 3, 4, 6 и 8 вершинных моделях Поттса в 1D антиферромагнетиках.

Главные выводы заключаются в следующем: МКЭ в поликристаллах, в отличие от такового эффекта в монокристаллах (рис.1), во-первых, не симметричен относительно точки фрустрации, а во-вторых, гораздо меньше по величине.

Работа поддержана проектом интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН, № 12-И-2-2020.

1. M. E. Zhitomirsky, A. Honecker, J. Stat. Mech. 252, 60 (1941).

2. E. Warburg, Ann. Phys. (Leipzig). 141, 13, (1881).

Получение тонких пленок высокодисперсного кремния через газофазное разложение перхлорсиланов

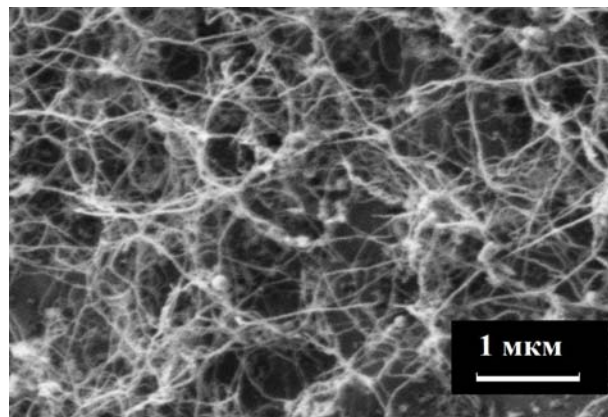
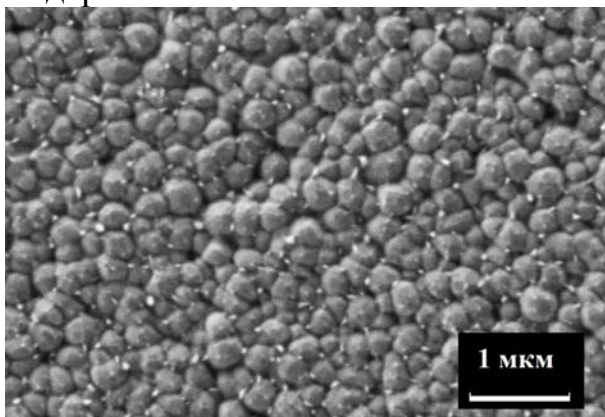
*Е.П. Симоненко^{1,2}, Н.П. Симоненко¹, Д.В. Гращенков³, Е.Н. Каблов³,
В.Г. Севастьянов¹, Н.Т. Кузнецов¹*

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

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

³ *Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, Москва, Россия*

Метод химического парофазного осаждения (CVD) имеет ряд существенных преимуществ в процессах получения наноструктурированных тонких пленок. Эффективность его применения во многом определяется свойствами прекурсоров. Для получения покрытий кремния перспективными прекурсорами могут быть перхлорсиланы с составом $\text{Si}_x\text{Cl}_{2x+2}$ (где $x - 3 \div 6$), так как они легко переходят в газовую фазу при сравнительно небольшом нагреве, а продуктами их термоллиза являются кремний и газообразные при температуре $>150^\circ\text{C}$ продукты – SiCl_4 и Si_2Cl_6 . В настоящей работе с применением жидкой фракции состава « $\text{Si}_3\text{Cl}_8 + \text{Si}_4\text{Cl}_{10}$ » и фракции состава « $\text{Si}_5\text{Cl}_{12} + \text{Si}_6\text{Cl}_{14}$ » исследовано влияние на микроструктуру кремния температуры в зонах парообразования и термодеструкции, а также времени выдержки.



Микроструктура покрытия кремния, полученного с использованием жидкой фракции перхлорсиланов при температуре в зоне термодеструкции 950° , в зоне парообразования $20 \pm 3^\circ\text{C}$ (слева) и $140 \pm 5^\circ\text{C}$ (справа)

Установлено, что в процессах образуются покрытия высокодисперсного кремния (размер кристаллитов, определенный по формуле Шерера, составил 15 ± 3 нм). При низкой температуре в зоне парообразования на начальном этапе формируются плотные покрытия из сферических частиц с диаметром $100 \div 500$ нм, на поверхности которых имеются существенно более мелкие частички вытянутой формы с диаметром 10-50 нм, при увеличении температуры испарения являющиеся точками роста для волокнистых образований (соотношение длина: диаметр >100).

Золь-гель синтез нанокристаллического оксида $ZrO_2-HfO_2-Y_2O_3$ с биоморфной структурой

Н.П. Симоненко, Е.П. Симоненко, В.Г. Севастьянов, Н.Т. Кузнецов

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

В настоящее время существует большая потребность в новых материалах, сохраняющих свою морфологию и другие свойства в широком интервале температур, а также в технологиях их получения. Благодаря высокой удельной площади поверхности такие вещества применяются в катализе, сенсорике, а также в качестве компонентов газовых и жидкостных фильтров. Оксид циркония-гафния, стабилизированный иттрием, состава $0,60ZrO_2-0,25HfO_2-0,15Y_2O_3$ является одним из наиболее перспективных тугоплавких оксидов, сохраняющих фазовую стабильность при температуре выше $2000^\circ C$ [1]. При этом золь-гель метод позволяет синтезировать тугоплавкие оксиды, в том числе сложного состава, в виде нанопорошков, тонких плёнок и высокодисперсных матриц композиционных материалов с использованием в качестве стартовых реагентов β -дикетонатов металлов [1-3].

Целью данной работы являлось исследование процесса синтеза нанокристаллического оксида $0,60ZrO_2-0,25HfO_2-0,15Y_2O_3$ с биоморфной структурой золь-гель методом. Для этого гидролитически активным раствором алкоксоацетилацетонатов циркония, гафния и иттрия, полученным путём деструктивного замещения хелатных лигандов ацетилацетонатов соответствующих металлов на алкоксо-группы, пропитывалась целлюлоза, после чего производилась её сушка при $70^\circ C$. При последующей термообработке был синтезирован целевой продукт, обладающий биоморфной структурой (рис 1).



Рис. 1. Морфология оксида $ZrO_2-HfO_2-Y_2O_3$, синтезированного при $1200^\circ C$

1. В.Г. Севастьянов, Е.П. Симоненко, и др., Журн. неорган. химии., 355-361, 57 (3), 2012
2. Е.П. Симоненко, Н.П. Симоненко, и др., Журн. неорган. химии., 1619-1626, 57 (12), 2012
3. Е.П. Симоненко, Н.П. Симоненко, и др., Композиты и наноструктуры, 52-64, 4, 2011

Секция «Биология и физика»

Распределение по размерам и форма белка α -кристаллина в растворе из методов аналитического ультрацентрифугирования и малоуглового рентгеновского рассеяния

С.В. Амарантов¹, Н.А. Чеботарёва², Н.Б. Полянский³, К.О. Муранов³

¹ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубников РАН, Москва, Россия*

² *Институт биохимии имени А.Н.Баха РАН, Москва, Россия*

³ *Институт биохимической физики им. Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия*

α -кристаллин - олигомерный полидисперсный белок массой около 700- 800 кДа, сформированный из мономеров αA - и αB кристаллина, играет важнейшую роль в поддержании прозрачности хрусталика глаза. Третичная структура субъединиц α - кристаллина и их расположение в олигомерах α -кристаллина (четвертичная структура) остаются неизвестны.

Методами аналитического ультрацентрифугирования и малоуглового рентгеновского рассеяния был исследован белок, выделенный из наружных отделов хрусталика (кортекс) 2х-годовалых бычков.

Показано, что при RT распределение по коэффициентам седиментации $c(s)$ включает основной пик с максимумом при $s_{20,w}=(18\pm 2)$ S, а также дополнительный пик при $s_{20,w}=(29\pm 1)$ S. Распределение $c(s)$ для α -кристаллина при 45⁰C характеризуется двумя основными пиками $s_{20,w}=(10,2\pm 0,3)$ и $(12,9\pm 0,3)$ S и одним минорным пиком при $s_{20,w}=(14,0\pm 0,3)$ S, что указывает на диссоциацию белка при этой температуре.

На основе данных ультрацентрифугирования обработка кривых $I_{\text{exp}}(s)$ осуществлялась двумя путями: в предположении полидисперсной (двух-компонентной) системы и монодисперсной системы. В последнем случае, по экспериментальной кривой малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) $I_{\text{exp}}(s)$ где s – модуль вектора рассеяния, нами был получен набор моделей формы белка α -кристаллина (далее частицы) в растворе. В рамках однородного, для плотности частицы, приближения были построены три трёхмерные модели формы с различной степенью разрешения. Первая модель – приближение формы частицы трёхосным эллипсоидом заданным своим форм-фактором $\langle \Phi(s, a, b, c) \rangle$, где параметры a, b, c - полуоси эллипсоида. Вторая модель – приближение формы частицы набором сферических гармоник. Третья модель – восстановление формы частицы методом поиска структуры, заданной своей аминокислотной последовательностью. Для этого из нуля функции парных расстояний внутри частицы $P(D_{\text{max}}) = 0$ вычислялась максимальная область поиска формы – шар диаметром D_{max} , определяющий max размер частицы. Последняя модель дала наиболее детальную форму частицы и минимальную разность (невязку) между экспериментальной кривой рассеяния и формфактором от построенной модели. Были измерены температурные зависимости кривых МУРР, ($20^0 < T < 80^0$). При $T > 55^0\text{C}$ наблюдается агрегация белка.

Структурная биология ткани в свете синхротронного излучения

А.А. Вазина^{1,2}

¹ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия*

² *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Наука о структурной биологии тканей находится в самом начале своего развития. Описание структурных особенностей биологических полимеров в наномасштабной шкале открывает принципиально новые возможности для изучения механизмов их функционирования. Метрические и топологические свойства физического пространства и поля, в которых образуются и существуют нанообъекты, обуславливают их функциональные особенности.

Концептуальная революция в области изучения наноструктурированных ансамблей обусловлена инструментальной революцией, связанной с развитием структурных методов на основе использования интенсивного синхротронного излучения. Нами были предложены подходы и создана экспериментальная техника, для нового направления исследований – структурной биологии ткани: методы скоростной малоугловой дифрактометрии с временным разрешением – «дифракционное кино». В активной поперечно-полосатой мышце были зарегистрированы короткоживущие состояния структуры.

Установлен аperiодической характер упаковки анизотропных доменов гигантского белка тайтина, обеспечивающего сверхвысокую эластичность мышцы. Показана ведущая роль поля внешних сил в формировании гетерофазных состояний, обеспечивающих мультифункциональный механизм белков иммуноглобулинового суперсемейства. Механизм сокращения мышцы следует рассматривать на основе принципа динамического сопряжения разносимметричных наноструктур с несоизмеримыми периодами.

Структурные исследования эпителиальных тканей и слизей выявили наличие высокой наноструктурной упорядоченности гигантских протеогликановых фибрилл, обусловленной регулярным прикреплением полисахаридных цепей к белковому кору с характерным периодом $4.65(\pm 0.15)$ нм, который инвариантен для всех типов эпителиальных тканей и слизей.

Показан вклад катионов металлов в структурную трансформацию протеогликанов, приводящую к нарушению наноструктурного гомеостаза эпителиальной ткани, в частности, при онкологической патологии и минерализации. Обсуждается роль протеогликановых систем в механизмах модификационной адаптации организма к окружающей среде. Модификационный механизм адаптации рассматривается также на примере наноструктурной динамики белков шелка, функционирующих вне организма.

Рассматриваются биофизические аспекты влияния высокочастотной электрохирургической сварки на процессы репарации поврежденной ткани.

Работы поддержаны грантом РФФИ № 11-02-00706

Исследование фазового состояния модельных липидных мембран на основе церамида 6 на синхротроне

А.Ю. Грузинов¹, О.Л. Орелович², Е.В. Ермакова², А.В. Забелин¹, О.В. Найда¹,
М.А. Киселев²

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Верхний роговой слой кожи млекопитающих (stratum corneum) – многослойная система, состоящая из отмерших клеток (корнеоцитов), погруженных в сложную смесь липидов. Основной его задачей является защита организма от воздействия инородных веществ и сохранения водного баланса организма. Важным является вопрос о детальном устройстве stratum corneum (SC) на наноуровне. В качестве модели данной биологической системы выступает искусственная смесь липидов SC.

Исследования, проведенные на синхротроне (НИЦ «Курчатовский институт»), показали наличие многофазной системы с разным межмембранным расстоянием. Регистрировалась температурная динамика системы и влияние изменений pH буферного раствора на формирование фаз. Высокая степень упорядоченности углеводородных хвостов говорит о преобладании кристаллической фазы в системе. Результаты электронной микроскопии также показывают существование кристаллической упорядоченности.

Полученные результаты позволят сделать выводы об устройстве естественного SC, что позволит разрабатывать более совершенные методы доставки лекарств с помощью везикулярных переносчиков через кожу и помочь в решении проблем, связанных с возникновением и развитием кожных заболеваний.

1. M. A. Kiselev, N. Yu. Ryabova, A. M. Balagurov, S. Dante, T. Hauss, J. Zbytovska, S. Wartewig, R. H. H. Neubert. New insights into structure and hydration of stratum corneum lipid model membrane by neutron diffraction. *European Biophys. J.* 34 (2005) 1030–1040.
2. M.A. Kiselev. Conformations of ceramide 6 molecules and chain-flip transitions in lipid matrix of the outermost layer of skin - stratum corneum. *Crystallography Reports*, 52 (2007) 525-528.

Исследование влияния низких температур на метастабильную β -модификацию хлорпропамида

А.И. Иваненко^{1,2}, Б.А. Колесов³, В.С. Миньков^{1,2}, Т.Н. Дребущак^{1,2},
Е.В. Болдырева^{1,2}

¹ Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

² Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

³ Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

Установление связи кристаллической структуры с физико-химическими свойствами и изучение способов влияния на них за счет внешних воздействий особенно важны для лекарственных веществ, склонных к полиморфизму.

Антидиабетический препарат хлорпропамид – хорошо известный модельный объект для исследования конформационного полиморфизма. На данный момент известно пять полиморфных модификаций, устойчивых при нормальных условиях (α , β , γ , δ и ϵ), а также ряд низкотемпературных модификаций (ϵ' , β^{II} и β^{III}). Полиморфы хлорпропамида различаются геометрией молекул и их упаковкой в кристаллической структуре при сходном мотиве водородных связей. Метастабильная β -модификация хлорпропамида выделяется среди других форм уникальным π -типом упаковки молекул, а также высокой растворимостью и способностью сохраняться неопределенно долго при нормальных условиях.

Целью данной работы было исследование влияния низких температур на кристаллическую структуру β -модификации хлорпропамида и сравнение результатов с эффектами, наблюдаемыми в аналогичных условиях в α - и ϵ -формах. В качестве основного метода исследования была выбрана поляризационная КР-спектроскопия. Для уточнения кристаллической структуры низкотемпературной фазы β -хлорпропамида при 20 К была использована монокристаллическая рентгеновская дифракция.

Поляризационная КР-спектроскопия в широкой области температур 4 – 300 К показала наличие низкотемпературного фазового перехода в β^{III} -форму при 60-80 К, в то время как в ранее описанном в литературе рентгеновском эксперименте данный фазовый переход регистрировался при 125-150 К [1]. КР-спектроскопия с изменением схемы эксперимента выявила сильный гистерезис – фазовый переход наблюдался уже при более высокой температуре. Таким образом, кинетика измерений оказывает существенное влияние на точку регистрируемого фазового перехода. Монокристаллическая рентгеновская дифракция показана, что фаза β^{III} стабильна до 20 К.

1. T. N. Drebushchak, V. A. Drebushchak, E. V. Boldyreva, Acta Cryst., 2011, vol. B67, p. 163–176.

Хиральный квазикристаллический порядок и додекаэдрическая геометрия капсидов малых вирусов

О.В. Коневцова¹, С.Б. Рошаль¹, В.Л. Лорман²

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

² CNRS – Université Montpellier 2, Montpellier, France

Понимание процессов организации вирусных оболочек (капсидов) и механизмов их самосборки не только помогает получить представление о взаимодействиях между белками, ответственных за способность вируса заражать здоровые клетки, но и разработать новые методы в области нанотехнологий. Как и в неорганических наноструктурах, препятствия на этом пути связаны и с наноскопическими размерами капсидов, и с их необычной топологией и симметрией.

В результате проделанной нами работы сначала на примере семейства Паповавирусов было показано существование совершенно нового типа организации, приводящего к хиральному квазикристаллическому пентагональному порядку белковых молекул в капсиде со сферической топологией и додекаэдрической геометрией [1], а впоследствии данный результат удалось обобщить и для капсидов малых вирусов. Новый тип порядка возможно описать с помощью разработанной нами концепции нелинейных фазонных деформаций в рамках классической теории упругости квазикристаллов, которая позволяет рассчитать расположение белков и, таким образом, объяснить самосборку белков в капсиды вирусов, несмотря на свою крайнюю сложность. Предложенная теория одинаково хорошо описывает как структуры, удовлетворяющие геометрической модели КК, так и противоречащие ей структуры (например, L-А вирус, Dengue вирус, вирус западного Нила, вирус крысиной полиомы, и т.д.). Помимо этого некоторые из структур, полученные теоретически в рамках теории кристаллизации Л.Д. Ландау [2], экспериментальное соответствие которым пока еще не было найдено, также могут быть получены в рамках разработанной нами теории.

1. O.V. Konevtsova, S.B. Rochal and V.L. Lorman, Chiral quasicrystalline order and dodecahedral geometry in exceptional families of viruses// Phys. Rev. Lett. 108, 038102 (2012).
2. Lorman V.L. and Rochal S.B. Density-Wave Theory of the Capsid Structure of Small Icosahedral Viruses // Phys. Rev. Lett. - 2007 №98. - 185502.

Влияние температуры и высокого давления на кристаллическую структуру хлорпроамида

Н.В. Лошак^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, Д.П. Козленко¹, Л.А. Булавин², Я.В. Вонсицки³,
К. Лате⁴, Б.Н. Савенко¹

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³Университет им. А.Мицкевича, Познань, Польша

⁴Helmholtz Centre Potsdam, Telegrafenberg, Potsdam, Гамбург, Германия

На этапах фармакологического производства возможно влияние различных побочных факторов на образец: компрессии, термического воздействия, химически-активной среды, - при которых в исходном сырье могут развиваться необратимые полиморфные превращения, приводящие к существенным изменениям фармакологического эффекта того или иного лекарственного препарата. Кроме того, исследование природы и механизмов полиморфных фазовых переходов в молекулярных системах является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния и молекулярной химии.

Одним из удобных модельных объектов для изучения полиморфных превращений в молекулярных кристаллах является хлорпроамид $C_{10}H_{13}ClN_2O_3S$. Кристаллическая структура хлорпроамида исследовалась методом рентгеновской дифракции при высоких давлениях до 4.2 ГПа и в температурном диапазоне 300-450 К. При давлении $P = 1.2$ ГПа найден полиморфный фазовый переход в моноклинную γ -форму, кристаллическая структура которой описывается орторомбической симметрией с пространственной группой $P2_1$. При нормальном давлении и при нагреве в хлорпроамиде не обнаружено полиморфных фазовых переходов вплоть до температуры его плавления $T = 396$ К. При рекристаллизации исходной α -формы хлорпроамида наблюдается появление дополнительной полиморфной ϵ -фазы. После рекристаллизации дополнительное воздействие высокого давления приводит к частичной аморфизации хлорпроамида при давлениях $P \sim 3$ ГПа. Получены барические и температурные коэффициенты для α и ϵ форм хлорпроамида.

Работа поддержана грантом РФФИ №11-02-00416-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 в рамках Федеральных целевых программ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Пространственная структура карбоксипептидазы Т из *Thermoactinomyces vulgaris* в комплексе с N-БОК-L-лейцином

В.И. Тимофеев¹, В.Х. Акпаров², И.П. Куранова¹

¹ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия*

² *Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов, Москва, Россия*

Пространственная структура рекомбинантной бактериальной карбоксипептидазы Т (КПТ) в комплексе с N-БОК-L-лейцином установлена при разрешении 1.38 Å. Кристаллы для рентгеновского исследования выращены в условиях невесомости методом встречной диффузии. На картах электронной плотности в активном центре фермента локализованы N-БОК-L-лейцин и ион сульфата. По положению боковой группы лейцина идентифицирован S1-субсайт КПТ и описано его строение. Сравнением структур этого комплекса и комплексов панкреатических карбоксипептидаз А и В с пептидными лигандами и селективными ингибиторами показано сходство строения S1-субсайтов во всех трёх карбоксипептидазах. Обнаружено, что сульфат ион занимает в субсайте S1' то же положение, что и С-концевая группа субстрата.

Секция «Теория, модели и расчеты»

Electric field effect on the electron-interface lo phonon scattering rates in quantum rings

G.B.Ibragimov, R.G.Abaszade, R.Z.Ibaeva

Institute of Physics, Academy of Science of the Azerbaijan, Baku, Azerbaijan

During the past few years, there has been considerable interest in investigating quantum rings both experimentally and theoretically. The electronic and optical properties of these systems are essential elements in developing the mesoscopic devices in the future. In exploring the physical properties such as carrier relaxation, optical properties of quantum rings, the electron phonon interaction is an important factor to be considered.

There has been considerable interest in the study of intersubband transitions in a quantum well (Q W) both in the presence and in the absence of an electric field applied perpendicular to the Q W layer plane. The reason behind the interest is practical device application. Theoretical studies on intersubband optical absorption under an electric field have pointed out an increase in the oscillator strength. In all the theories the intra- and intersubband relaxation rates come into the calculation of the absorption coefficient. In the present work we report calculations of electron scattering rates due to optical phonon modes when an electric field is applied perpendicular to the quantum ring layer, and investigate how the scattering rates are modified. As a first step, we consider intrasubband relaxation for the lowest subband.

The electron scattering rate W_F due to the interface mode is obtained from

$$W_F = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |M_{if}|^2 \delta(E_f - E_i \mp \hbar\omega_{\alpha\mu})$$

Where E_i and E_f denote the initial and final state energies of electron and $\hbar\omega_{\alpha\mu}$ the interface phonon energy. The summation is over all final states f of the system. M_{if} is matrix element for transition from an electronic state i to another state f .

To evaluate Eq. We consider a single electron quantum rings where electrons are free to move in the layer plane and electric field F is applied in a direction perpendicular to quantum ring layer.

In order to facilitate comparison, a similar expression for the transition probability or scattering rate without an applied field is needed.

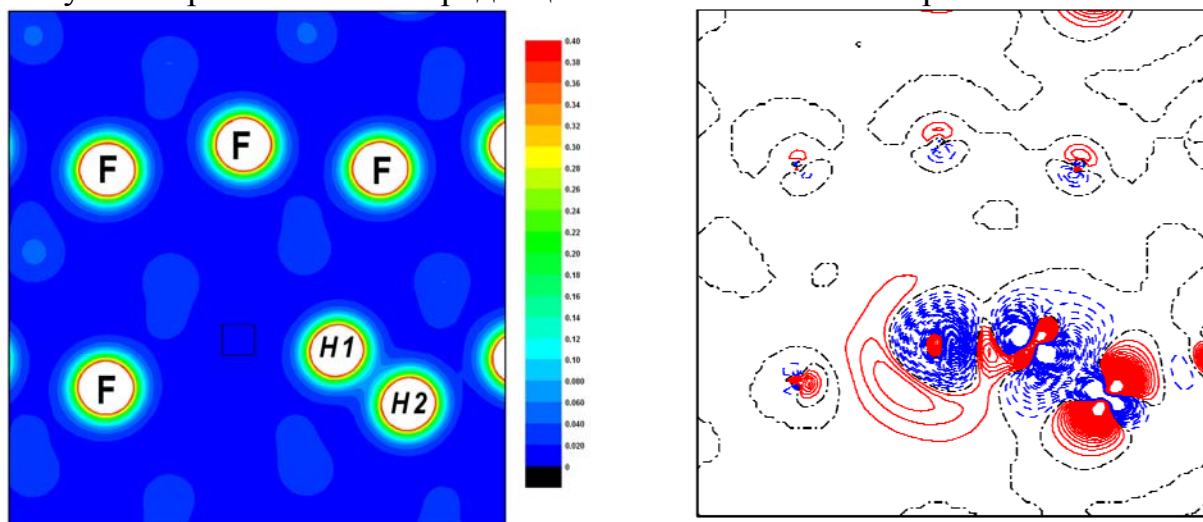
1. F.M. Alves, G.E. Marques, V. Lopez - Richard and C Trallero - Giner (2007) Spin-orbit effects in single electron quantum rings. *Semicond. Sci. Technol.* 22, 301-308.
2. D.Ahn and S.H.Chuang., (1988) Electric field dependence of intrasubband polar – optical - phonon scattering in a quantum well. *J. Phys. Rev B* 37 2529-2535
3. P.K.Basu, D.Raychaudhury. (1990) Alloy – disorder - induced intrasubband scattering in a quantum well under an electric field. *J.Appl.Phys.* 68: 3443-3444.
4. G. B. Ibragimov (2002) Interface roughness-induced intrasubband scattering in quantum well

Неэмперические расчеты радиационных дефектов в кристаллах фторида магния

Ф.У.Абуова¹, А.Т.Акылбеков¹, А.У.Абуова¹, Г.А.Каптагай¹

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

Кристаллы MgF_2 со структурой рутила являются важными оптическими материалами с многочисленными применениями. Помимо этого, еще одним полезным свойством MgF_2 является его радиационная стойкость. Объективы и оптические окна из фтористого магния (MgF_2) прозрачны в чрезвычайно широком диапазоне энергий фотонов от вакуумного ультрафиолета до инфракрасного. В данной работе мы обсуждаем результаты неэмпирических расчетов радиационных дефектов в этом материале. Расчеты основаны на методе функционала плотности (DFT) в приближении гибридного обменно-корреляционного функционала B3PW, используя компьютерную программу CRYSTAL и сверхячейки разного размера. С целью анализа радиационных и оптических свойств материала, проанализированы электронная, атомарная структура и распределение электронной плотности для пар дефектов Френкеля (F-H пары) на разных взаимных расстояниях. Обсуждается стабилизация подвижных H центров путем образования междуузельных F_2 молекул и их роль в высокой радиационной стойкости материала.



a)

б)

Перераспределение полной а) и разностной б) электронной плотности вокруг F–H пар.

1. A. F. Vassilyeva, R. I. Eglitis, E. A. Kotomin, A. K. Dauletbekova, *Physica B* 2010, **405**, 2125
2. A.F. Vassilyeva, R.I. Eglitis, E.A. Kotomin, A. K. Dauletbekova, *Centr. Eur. J. Phys.*, 2011, **9**, 515.

Динамическая спиновая восприимчивость электронно-допированного сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_4$. Сопоставление с данными по рассеянию нейтронов

К.С. Александрова¹, А.И. Андреев¹, М.В. Ерёмин²

¹Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

В рамках t-J модели уточнена формула для динамической спиновой восприимчивости электронно-допированного сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_4$, самосогласованным образом учитывающая взаимное влияние намагниченностей коллективизированных и локализованных электронов. Предполагается, что данное уточнение позволит объяснить некоторые особенности в рассеянии нейтронов обнаруженные в работе [1].

Аналитические расчеты, проведенные методом функций Грина, позволили найти замечательное соотношение между функциями, входящими в промежуточные формулы для спиновой восприимчивости:

$$\pi(\omega, q) = 1 - \omega \zeta(\omega, q) - \pi'(\omega, q), \quad (1)$$

где

$$\pi(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k \frac{t'_k f_k^h - t'_{k+q} f_{k+q}^h}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \quad \zeta(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}, \quad \pi'(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k \frac{t'_k (1 - f_k^h) - t'_{k+q} (1 - f_{k+q}^h)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}},$$

$t'_k = 2(1 - F_1)t_1(\cos k_x a + \cos k_y a) + 4(1 - F_2)t_2 \cos k_x a \cos k_y a + 2(1 - F_3)t_3(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a)$ – перенормированный фурье-образ интеграла перескока в приближении сильной связи с учетом трех ближайших соседей, F_i – параметр расщепления, $P = (1 + \delta)/2$ – параметр заполнения зоны, δ – среднее число носителей заряда на элементарную ячейку, f_k^h – ферми-функции в дырочном представлении.

Соотношение (1) позволяет найти связь между спиновыми корреляционными функциями $K_i = 4\langle S_0^z S_i^z \rangle$ и параметрами расщепления F_i :

$$F_i = \frac{|K_i|}{(1 + \delta)^2 - 2|K_i|}. \quad (2)$$

Это же выражение (1) совместно с перенормированным законом дисперсии квазичастиц:

$$\varepsilon_k = \sum_l t_{li} \left(\frac{1 + \delta}{2} + \frac{2}{1 + \delta} (1 + 2F_l) \langle S_i^z S_i^z \rangle \right) e^{ik(R_l - R_i)} \quad (3)$$

позволяет находить самосогласованно затравочные интегралы перескока. Параметры зоны (в мэВ) $t_{eff}^{(1)}=270$, $t_{eff}^{(2)}=-108$, $t_{eff}^{(3)}=27$ брались согласно [2], получившиеся интегралы перескока: $t_1=742$, $t_2=-204$, $t_3=44$.

1. Jun Zhao, F. C. Niestemski, et al., Nature Physics, v.7, 719 (2011)
2. J.P. Ismer, I. Eremin, et al., Physical Review Letters, v.99, p.047005 (2007)

Моделирование электронных свойств и динамики решётки ScF₃ из первых принципов

П. Жгун¹, Д. Боcharов^{1,2}, С. Пискунов², А. Кузьмин², Ю. Пуранс²

¹ Латвийский Университет, Рига, Латвия

² Институт физики твёрдого тела Латвийского университета, Рига, Латвия

Фторид скандия ScF₃ принадлежит к типу перовскитоподобных соединений с простой кубической решёткой, сходных с более изученным ReO₃. Большой интерес к этому материалу появился в связи с недавно открытым в нём эффектом негативного термического расширения, проявляющемся в широком диапазоне температур [1].

В данной работе представлены результаты моделирования электронных свойств и динамики решётки фторида скандия [2], полученные из первых принципов методом функционала плотности в рамках компьютерных пакетов CRYSTAL [3] и VASP [4]. Методами гибридного функционала плотности была определена ширина запрещённой зоны, равная 8-10 eV, что согласуется с ранее полученными экспериментальными оценками [5], а также построена зонная структура. Полученная в расчётах плотность электронных состояний хорошо согласуется с экспериментальными результатами фотоэлектронной [6] и рентгеновской спектроскопии [5]. Рассчитанные фононные кривые дают разумное согласие с предыдущими нейтронными и теоретическими исследованиями [7].

Полученные результаты о свойствах фторида скандия, всё ещё мало изученных как теоретически, так и экспериментально, могут быть использованы для дальнейшей интерпретации явления негативного термического расширения.

1. B.K. Greve, K.L. Martin, P.L. Lee, P.J. Chupas, K.W. Chapman and A.P. Wilkinson, *J. Am. Chem. Soc.*, 132, 15496 (2010).
2. P. Zghun, D. Bocharov, S. Piskunov, A. Kuzmin, J. Purans, *submitted to JPCS* (2013),
3. <http://arxiv.org/pdf/1211.5697.pdf>
4. CRYSTAL09 User's Manual (Torino: University of Torino), <http://www.crystal.unito.it/>
5. VASP the GUIDE (Wien: University of Wien), <http://cms.mpi.univie.ac.at/VASP/>
6. M. Umeda, Y. Tezuka, S. Shin and A. Yagishita, *Phys. Rev. B*, 53, 1783 (1996).
7. S. Shin, Y. Tezuka, T. Ishii, and Y. Ueda, *Solid State Commun.*, 87, 1051 (1993).
8. C.W. Li, X. Tang, J.A. Muñoz, J.B. Keith, S.J. Tracy, D.L. Abernathy and B. Fultz, *Phys. Rev. Lett.*, 107, 195504 (2011).

Изгибные колебания винтовой дислокации вблизи точки структурного фазового перехода

В.Н. Нечаев, В.В. Дежин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

В настоящем докладе рассмотрены колебания винтовой дислокации, лежащей вдоль оси Oz с вектором касательной к линии дислокации $\vec{\tau}_0 = (0, 0, -1)$, вектором Бюргера $\vec{b} = (0, 0, b)$ и вектором нормали к плоскости скольжения дислокации $\vec{n} = (0, 1, 0)$. Ограничимся случаем малых колебаний дислокации вблизи положения равновесия. Тогда в линейном по смещению дислокации $u = u(z, t)$ приближении $\vec{\tau} = (-\partial u / \partial z, 0, -1)$ и $\delta(\vec{\xi}) = \delta(x)\delta(y) - \delta(y)\delta'(x)u(z)$, где $\vec{\xi}$ – двумерный радиус-вектор, отсчитываемый от оси дислокации в плоскости, перпендикулярной вектору $\vec{\tau}$, и система уравнений, описывающих колебания сегнетоэластического кристалла с винтовой дислокацией запишется в виде

$$\eta_1(\vec{r}, t) = -3\eta_s g \int \chi(\vec{r} - \vec{r}', t - t') p(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 f_{\perp}}{\partial t^2} - \Delta f_{\perp} + \frac{3b}{1+\nu} \frac{\partial^2 p}{\partial y \partial z} - 2\mu g b \eta_s \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial y \partial z} = \\ & = -\mu b^2 \left(\frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \delta(x) + \delta'(x) - \delta''(x)u \right) \delta(y), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \Delta p + \frac{4}{3} \mu \frac{1+\nu}{1-\nu} g \eta_s \left(\frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial t^2} - \Delta \eta_1 \right) = \frac{2}{3} \mu b \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\partial u}{\partial z} \delta(x) \delta'(y). \quad (3)$$

Здесь $\eta_1 = \eta - \eta_s$ – отклонение параметра порядка от равновесного значения η_s в кристалле без дислокации, $\chi = \chi(\vec{r}, t)$ – функция отклика параметра порядка на гидростатическое давление $p(\vec{r}, t)$, g – постоянный стрикционный коэффициент, $c_t = \sqrt{\mu/\rho}$ – скорость поперечного звука, ρ – плотность вещества кристалла, μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, $f_{\perp}(\vec{r}, t)$ – проекция силы Пича-Келера на плоскость скольжения. Решая систему уравнений (1)–(3) в представлении Фурье с граничным условием (равенство нулю силы Пича-Келера на линии дислокации), находим частоты собственных колебаний дислокации в различных пределах, изменение эффективной массы и эффективной жесткости дислокации, изменение скорости изгибных волн вдоль дислокации, а также дополнительный вклад в затухание ее колебаний, вызванные взаимодействием с параметром порядка.

Расчет характеристик области пространственного заряда тонких пленок узкощелевых полупроводников

И.С. Дубицкий¹, А.М. Яфясов¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время, в связи с быстрым развитием наноэлектроники сохраняет свою актуальность задача построения модели области пространственного заряда (ОПЗ) тонких пленок с учетом размерного квантования. Особый интерес представляет проблема моделирования свойств ОПЗ узкощелевых полупроводников.

Легкие дырки и электроны в таких материалах обладают кейновскими (релятивистскими) законами дисперсии. В то же время тяжелые дырки имеют параболическую дисперсионную зависимость. Для образцов, толщина которых превышает длину волны Де Бройля в данном материале, вычисление характеристик ОПЗ может быть произведено посредством феноменологической теории.

Однако для тонких пленок (толщина, которых меньше длины волны Де Бройля) необходим учет эффекта двумеризации электронного и дырочного газов. При комнатных температурах огибающие волновых функций электронов и легких дырок описываются уравнением Клейна-Гордона-Фока, огибающие волновых функций тяжелых дырок удовлетворяют уравнению Шредингера. Потенциал, входящий в данные уравнения, должен быть найден с помощью уравнения Пуассона, правая часть которого, в свою очередь, определяется решением уравнений Шредингера и Клейна-Гордона-Фока. Таким образом, для корректного определения характеристик ОПЗ необходимо решить систему уравнений Пуассона, Клейна-Гордона-Фока и Шредингера.

В работе предложена и реализована методика самосогласованного решения данной системы уравнений на примере соединения кадмий-ртуть-теллур. Вычислены подзонные законы дисперсии, ход потенциала в кристалле, плотность заряда, вольт-фарадные характеристики образцов. Установлены границы применимости феноменологического описания тонких пленок. Обнаружено явление линейаризации хода потенциала в кристаллах малой толщины. Выявлено влияние подсистемы тяжелых дырок на свойства ОПЗ.

1. И. С. Дубицкий, А. М. Яфясов, Расчет вольт-фарадных характеристик тонких пленок полупроводников, Тринадцатая всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектроники, Санкт-Петербург, тезисы докладов, с.9

Исследование энтропии смешения в двухкомпонентной решёточной модели одноосных сегнетоэлектриков

Н.В. Евстигнеева¹, А.А. Шнайдер¹, А.Ю. Захаров¹

¹ *Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия*

Исследована бинарная решёточная модель сегнетоэлектрика.

Система состоит из N_1 диполей первого типа имеющих проекции дипольного момента на выделенное направление $\pm S_1$, и N_2 диполей второго типа имеющих проекции $\pm S_1$. Взаимодействие между диполями не зависит от расстояния, а определяется только их взаимной ориентацией.

Гамильтониан системы при наложении внешних полей h_1, h_2 :

$$H = -\frac{J_{11}}{2} S_1^2 - \frac{J_{22}}{2} S_2^2 - \frac{J_{12}}{2} S_1 S_2 - h_1 S_1 - h_2 S_2 .$$

где J_{ij} - энергия взаимодействия между частицами i -го и j -го сортов, причём поле h_i действует, только на частицы i -го сорта.

С помощью преобразования Стратоновича-Хаббарда получено интегральное представление статистической суммы системы диполей. Вычисление производящего функционала методом перевала позволило найти свободную энергию Гельмгольца и определить функциональную зависимость энтропии смешения от состава. Показано, что учёт взаимодействия между диполями различных сортов приводит к появлению несимметричной зависимости энтропии смешения относительно линии равных концентраций.

Топологические состояния высокотемпературного моттовского фазового перехода в V_2O_3

*Л.В. Ельникова*¹

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия*

Несмотря на более чем сорокалетнюю литературную историю [1,2], полуторная окись ванадия V_2O_3 по сей день не перестает притягивать к себе внимание исследователей различных направлений теоретической и экспериментальной физики, представляя феномен сложных спин-орбитальных корреляций и проблему спиновой идентичности ионов ванадия, обуславливающих наблюдаемые эффекты анизотропии относительного спинового и орбитального момента на протяжении всей фазовой диаграммы, состоящей из низкотемпературной антиферромагнитной фазы (AFI) и двух высокотемпературных парамагнитных фаз металла (PM) и изолятора (PI). PM \leftrightarrow PI переход является переходом типа Мотта-Хаббарда, и в этой связи V_2O_3 имеет ряд технологических приложений в полевых транзисторах, современных устройствах спинтроники и пр.

Наряду с методами рентгеновского поглощения и дифракции [3,4] данные методов нейтронного рассеяния [5,6] вносят существенный вклад в идентификацию спиновых и орбитальных состояний высокотемпературных фаз и позволяют объяснять характер орбитального заполнения.

Теоретическая интерпретация влияния решеточных фононов и спин-орбитального взаимодействия на высокотемпературные фазы [7] в формализме димеров, составленных из ионов ванадия [8], признается наиболее адекватной моделью, и может применяться для описания киральных состояний.

В данной работе анализируются топологические дефекты типа монополей и инстантонов, которые обнаруживаются при описании фотоиндуцированных конфигураций на К-кромках V_2O_3 , и выясняется их роль в PM—PI переходе.

1. D. B. McWhan, T. M. Rice, and J. P. Remeika, Phys. Rev. Lett. 23, 1384 (1969).
2. C. Castellani, R. C. Natoli, J. Ranninger, Phys. Rev. B 18, 4945 (1978).
3. P. Hansmann, M. W. Haverkort, A. Toschi, G. Sangiovanni, F. Rodolakis, J. P. Rueff, M. Marsi, and K. Held, Phys. Rev. B 85, 115136 (2012).
4. S. W. Lovesey, E. Balcar, K. S. Knight, et al., Physics Reports 411, 233 (2005)
5. G. Aeppli et al., in Spectroscopy of Mott Insulators and Correlated Metals, edited by A. Fujimori and Y. Tokura (Springer, Berlin, 1995)
6. W. Bao et al., Phys. Rev. Lett. 78, 507 (1997).
7. S.Yu. Ezhov, V.I. Anisimov, D.I. Khomskii et al., Phys. Rev. Lett. 83, 4136 (1999).
8. A. Tanaka, Journal of the Physical Society of Japan 71, 1091 (2002).

Подавление `коротких' гравитационных волн в новой гравитации 4го порядка

И.Л. Жогин

ИПП «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

Существует единственный вариант теории абсолютного параллелизма (АП; нельзя изменить даже число измерений, $D=5$), решения которого свободны от сингулярностей [1]. Из этой теории может следовать ряд феноменологий, включая космологическую модель (релятивистски расширяющаяся S^3 -оболочка, или продольная сферическая волна), феноменологию топологических зарядов и квази-зарядов (топологическая «надстройка», выглядящая как вариант квантовой теории поля), а также некоторую теорию гравитации на очень «толстой» (в сопутствующей системе), $L \sim \text{крс}$, бране. Новую гравитацию представляют лагранжевы уравнения 4-го порядка, но с дополнительным уравнением 2-го порядка, связывающим тензор Риччи с продольной поляризацией. Тензор энергии-импульса имеет положительную энергию, однако вклад в него дают только три поляризации (из пятнадцати; при этом псевдотензор энергии-импульса тривиален, т.е. нет нетривиальных законов сохранения, но возможны только приближенные законы сохранения, связанные с симметриями и векторами Киллинга). Что еще замечательней, так это линейная неустойчивость трех «невесомых» поляризаций, что делает неизбежным развитие (практически из «ничего») сильных нелинейностей, вплоть до рождения пар топологических (квази)зарядов.

Добавка к ньютоновской силе притяжения, зависящая здесь от двух параметров (би-Лаплас уравнение) должна выходить из нуля (при учете уравнения связи; т.е. риндлеровская поправка исчезает), а на больших расстояниях спадает как $1/r$ (логарифмический рост гравпотенциала останавливается на масштабе крупнейших неоднородностей плотности). Поэтому в этой теории нет нужды в темной материи (как, впрочем, и в темной энергии).

Характерный большой размер L (толщина браны по дополнительному измерению; это параметр решения, а не теории) «превращается» в планковскую длину в результате «перенормировки» энергии (вместо «геометрической энергии» кванта, которая очень мала и определяется не только частотой пси-функции, но и амплитудой стохастического ансамбля волн, «весомых» поляризаций, вводится «физическая энергия», равная просто частоте фотона).

Исходя из ковариантного уравнения генерации гравитационных волн (ГВ; уравнение эволюции тензора Римана получаем дифференцированием тождеств Бианки), можно показать, что в новой гравитации излучение *коротких* ГВ подавлено с фактором λ^2/L^2 (относительно ОТО, по амплитуде; λ – длина волны).

1. Zhogin I.L. Old and new research on the Absolute Parallelism theory. Lambert Academic Publishing: 2010, ISBN 978-3-8383-8876-2; arXiv:gr-qc/0412130v2. Absolute parallelism, modified gravity, and suppression of gravitational `short' waves. Proceedings of International Scientific Meeting PIRT-2011 (Moscow: 4-7 July, 2011). Moscow, 2012. 337-346; arXiv:1109.1679.

Квантовая критичность и ближний магнитный порядок у $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$.

С.В. Демисhev¹, В.В. Глушков^{1,2}, И.И. Лобанова^{1,2}, Т.В. Ищенко¹,
Н.Е. Случанко¹, С.В. Григорьев³

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

² Московский физико-технический институт, Москва, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Известно, что рост концентрации железа x в твердых растворах замещения $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ индуцирует уменьшение температуры перехода в магнитоупорядоченное состояние T_c , и окрестность $T > T_c$ характеризуется наличием промежуточных фаз, обусловленных флуктуациями параметра порядка [1,2]. Исчезновение дальнего магнитного порядка происходит в окрестности $x^* \sim 0.11-0.14$ [1,2], однако, несмотря на выполнение квантового критического условия $T_c(x > x^*) = 0$, о наблюдении аномалий физических характеристик, характерных для квантового критического режима до сих пор не сообщалось.

В настоящей работе промежуточные фазы рассматриваются как фазы с ближним магнитным порядком. Показано, что для определения температуры перехода в фазу с ближним магнитным порядком $T_s(x)$ могут быть использованы как особенности производной магнитной восприимчивости [1], так и анализ данных намагниченности в координатах Белова-Аррота. Найдено, что $T_s(x > x^*) \neq 0$ и обращение этой характерной температуры в ноль происходит при $x = x_c = 0.24$. В области $x > x_c$ температурные зависимости магнитной восприимчивости описываются степенным законом $\chi \sim 1/T^\xi$ с $\xi = 0.5-0.6$, характерным для квантовой фазы Гриффитса, образованной спиновыми кластерами нанометрового размера.

Для описания магнитной фазовой диаграммы $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ предложена модель учитывающая наличие двух типов флуктуаций параметра порядка-квантовых и классических, причем возникновение ближнего магнитного порядка в области $0 < x < x_c$ связывается с неоднородностями магнитной структуры перколяционного типа, задающимися радиусом корреляции бесконечного кластера. Данный подход позволяет количественно описать экспериментальную зависимость $T_s(x)$ и объяснить существование низкотемпературной аномалии при $T \sim 15$ К, обнаруженной ранее у MnSi [2].

1. S. V. Grigoriev, E. V. Moskvina, et al., Phys. Rev. B, **83**, 224411 (2011)

2. S. V. Demishev, V. V. Glushkov, et al., Phys. Rev. B **85**, 045131 (2012)

Самосогласованные вычисления спиновых корреляционных функций электронно-допированного сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_4$

Н.И. Канзулов¹, А.И. Андреев¹

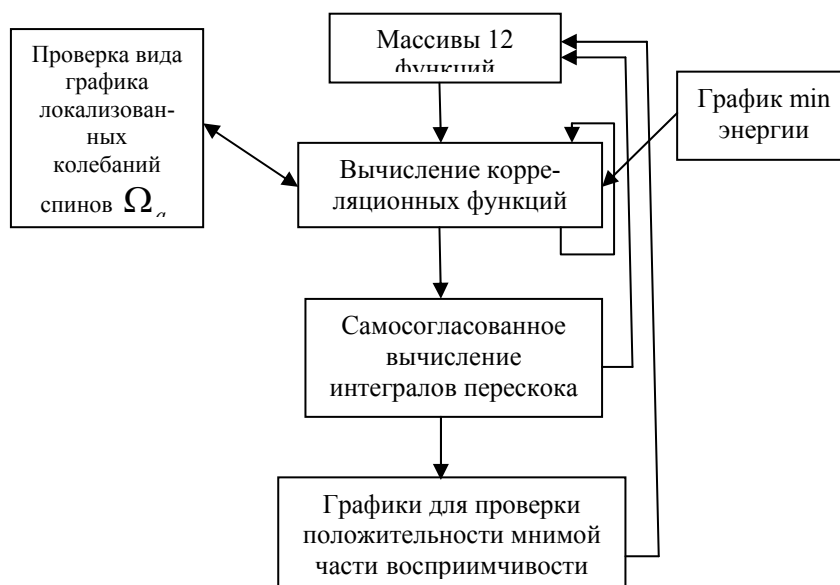
¹*Марийский государственный университет», Йошкар-Ола, Россия*

Полученное в рамках t-J модели выражение для динамической спиновой восприимчивости электронно-допированного сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_4$, самосогласованным образом учитывающее взаимное влияние намагниченностей коллективизированных и локализованных электронов [1], позволяет провести численные расчеты по самосогласованному вычислению спиновых корреляционных функций.

Формула для таких расчетов имеет вид

$$\langle S_i^- S_j^+ \rangle = \frac{1}{\pi} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \iiint \text{cth} \left(\frac{\beta\omega}{2} \right) \text{Im} \chi^{+-}(q, \omega) e^{iqR_{ij}} d\omega dq_x dq_y. \quad (1)$$

Здесь $\text{Im} \chi^{+-}(\omega, q)$ мнимая часть спиновой восприимчивости. Для нахождения данных трехмерных интегралов необходима база 12-ти функций, входящих в выражение для $\text{Im} \chi^{+-}(\omega, q)$. Численные расчеты по получению трехмерных массивов этих 12-ти функций размерностью $120 \times 120 \times 350$ проводились на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН. Дальнейшее интегрирование предполагает самосогласование входных и выходных спиновых корреляционных функций, так как сама спиновая восприимчивость зависит от них. Вычислительный процесс частично представлен на схеме. В общем случае график зависимости корреляционных функций от расстояния имеет осциллирующий характер (как обменный интеграл во взаимодействии РККИ).



1. А.И. Андреев, М.В. Ерёмин, И.М. Ерёмин, ЖЭТФ, т.135, с.65-76, (2009)

Фрустрации и фазовые переходы в модели Изинга на квадратной решетке

Ф.А. Кассан-Оглы¹, М.К. Рамазанов², А.И. Прошкин¹, А.К. Журавлев¹

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики ДНЦ РАН, Махачкала, Россия*

В работе исследована проблема возникновения фрустраций и подавления фазовых переходов в модели Изинга на 2D квадратной решетке репличным методом Монте Карло при учете взаимодействий между ближайшими (J_1 и J_2) и вторыми (J_3 и J_4) соседями и во внешнем магнитном поле.

В зависимости от знаков и относительных величин взаимодействий и магнитного поля найдены точки и линии фрустраций, в которых исчезают фазовые переходы (энтропия при этом стремится к ненулевому значению при $T \rightarrow 0$, а теплоемкость утрачивает лямбда-образную особенность). Получены зависимости точек фазового перехода от знаков и относительных величин взаимодействий и магнитного поля с вырождением по знаку взаимодействий.

Обнаружен новый эффект – расщепление теплоемкости вблизи точек фрустраций. Найдены новые магнитные структуры, а также новый тип упорядочения, а именно, упорядочение в одном направлении и отсутствие упорядочения по другому направлению.

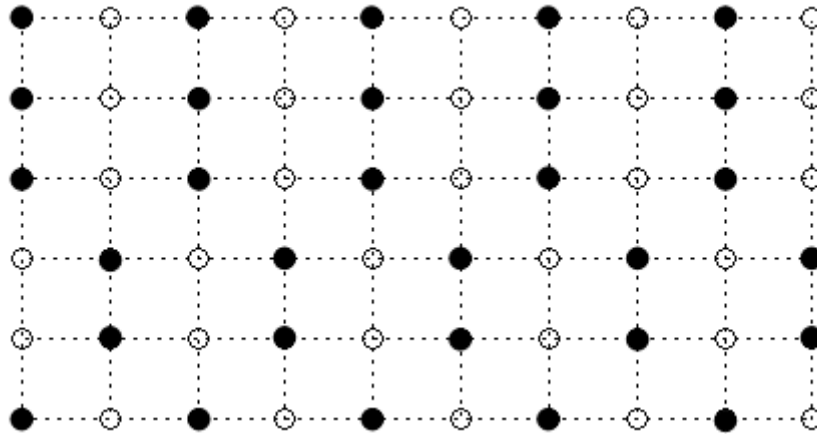


Рис.1. Антиферромагнитное упорядочение в каждом горизонтальном ряду. Условия фрустраций: $|J_1| > |J_2|$, $J_2 = J_3 + J_4$.

Работа поддержана Проектом Президиума РАН, № 12-П-2-1041.

1. F.A. Kassan-Ogly, V.V. Men'shenin, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, *Solid State Phenomena*. 168-169, 435, (2011).
2. F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, *JMMM*. 324, 3418 (2012).

Моделирование 48-счетчикового порошкового дифрактометра на реакторе ВВР-М с помощью программного пакета McStas

П.И. Коник¹, Е.В. Москвин^{2, 1}

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

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

Моделирование методом Монте-Карло играет важную роль в процессе дизайна, расчета и оптимизации инструментов нейтронного рассеяния. Адекватная, оттестированная и грамотно разработанная математическая модель нейтронного инструмента открывает большие возможности для разработки новых и модернизации существующих инструментов. Хотя аналитические методы моделирования по-прежнему актуальны, только моделирование методом Монте-Карло позволяет работать с инструментами сложной геометрии и использующими поля сложной конфигурации. В настоящее время, специальные программные пакеты моделирования нейтронных инструментов – McStas, VITESS и другие – используются при разработке и оптимизации практически всех строящихся и модернизируемых нейтронных инструментов.

Завершение строительства реактора ПИК требует оснащения его десятками инструментов нейтронного рассеяния. Общая длина нейтроноводов достигает 300 м. В предыдущей работе мы использовали метод Монте-Карло для оптимизации параметров нейтроноводов, ведущих к трем инструментам – трехосному спектрометру (IN2), порошковому дифрактометру (D2) и рефлектометру поляризованных нейтронов (R2).

В данной работе мы представляем модель 48-счетчикового порошкового дифрактометра, расположенного на 1 пучке реактора ВВР-М. Получены, распределения интенсивности нейтронного пучка на разных элементах установки (монокроматор, коллиматоры и т.д.), а также его горизонтальные и вертикальные расходимости. Получены нейтронограммы рассеяния от различных моделей порошковых образцов.

1. Москвин Е.В. «Расчет нейтроноводной системы дифрактометра D2, трехосного спектрометра IN2 и рефлектометра R2».

Магнитохиральные сплавы и молекулярные магнетики: разные терминологии одинаковых явлений

О.В. Коплак

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Магнитохиральные неорганические сплавы с геликоидальной и более сложными спиновыми ориентациями, управляемыми взаимодействием Дзялошинского-Мория, появились и исследуются уже более полувека. Методами нейтронографии, мюонной дифракции и др. в них были детально установлено распределение спиновой плотности и разработаны теоретические представления о стационарных основных спиновых состояниях. Динамические магнитные эффекты в сплавах стали привлекать интерес сравнительно недавно. Разного рода нелинейные спиновые возбуждения (скермионы и др.) были экспериментально обнаружены и в настоящее время представляют собой модное направление исследований.

Вместе с тем, появились магнитохиральные объекты другого типа – металл-органические кристаллы, синтезированные в химических лабораториях, и допускающие химический и спиновый дизайн (модификацию структуры, спиновой структуры и магнитных свойств). В них также обнаруживается целый ряд неожиданных фундаментальных явлений, связанных с нелинейными спиновыми возбуждениями (спиновые солитоны и т.п.).

Эти две ветви одной и той же серии явлений, развивающихся в спиновом подпространстве и почти не связанных с химическим составом соединений, изучаются по-отдельности разными группами специалистов. Критический анализ публикаций показывает, что зачастую можно найти не только одинаковые проявления спиновых возбуждений, но и получить новые фундаментальные результаты общего характера, ставя в один ряд сплавы с сильным обменным взаимодействием и сравнительно небольшим параметром решетки с металл-органическими молекулярными магнетиками, как правило, обладающими слабым обменом и «рыхлой» структурой (большим периодом кристаллической решетки).

Цель данной работы заключалась в аналитическом обзоре уже полученных результатов и попытке их обобщения. Например, нами показано, что главным фактором, регулирующим торможение доменных стенок рельефом Пайерлса (кристаллическим потенциальным рельефом) является отношение ширины доменной стенки к параметру решетки W/a для всех вышеупомянутых материалов. В результате в ряду неорганических и металл-органических соединений может быть обнаружено пороговое значение W/a , при котором возникает чувствительность динамики доменных стенок к рельефу Пайерлса, отличающемуся в рацемических и хиральных кристаллах.

Структурные превращения в металлах пятой, шестой и восьмой групп при высоких давлениях

*А.В. Луговской, И.Ю. Мосягин, М.П. Белов, Н.Г. Бондаренко,
О.М. Красильников, Ю.Х. Векилов*

Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия

Структурные превращения в металлах при больших степенях сжатия, когда давление сравнимо по величине с объемным модулем, рассмотрены в рамках теории фазовых переходов Ландау с учетом нелинейных эффектов теории упругости третьего и четвертого порядка. Параметром порядка являются компоненты тензора конечных деформаций, а параметрами модели – эффективные упругие постоянные второго, третьего и четвертого порядка. Из анализа модели следует, что при таких давлениях кристаллическая решетка может стать неустойчивой к однородным сдвиговым деформациям. В результате произойдет переход в спонтанно деформированное состояние, устойчивость которого обеспечивается нелинейной упругостью образца (деформационные фазовые переходы, в иностранной литературе – *elastic phase transitions*).

В рамках теории функционала плотности разработана методика расчета эффективных упругих постоянных различного порядка и рассчитаны постоянные второго и третьего порядка ряда тугоплавких металлов пятой, шестой и восьмой групп в широком интервале давлений, а так же кривые дисперсии фононов в высокосимметричных направлениях.

На основании этих данных проанализированы тенденции изменения упругих постоянных, возможность потери устойчивости решетки к однородным деформациям. Для различных случаев потери устойчивости рассмотрены возможные равновесные фазы высокого давления и условия их существования.

Показано, что ОЦК структура тантала, ниобия и ГПУ решетка рутения остаются устойчивыми к однородным деформациям при давлениях до 800 ГПа. В случае ОЦК молибдена при давлениях, превышающих 500 ГПа наблюдается сильное смягчение эффективной упругой постоянной, соответствующей тетрагональной деформации, что указывает на понижение механической стабильности данной структуры в исследованном диапазоне и возможность фазового перехода в мегабарном диапазоне давлений.

Исследования выполнено в рамках проекта, поддержанного грантом Российского Фонда фундаментальных исследований № 10-02-00156-а и Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.А18.21.0893, под руководством профессора, д.ф.-м.н Векилова Ю.Х. и с.н.с., д.ф.-м.н. Красильникова О.М..

Квантовомеханический вывод формулы Мольер для интенсивности малоуглового рассеяния

Ф.С. Джебпаров, Д.В. Львов

Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия

Малоугловое рассеяние (МУР) является одним из основных методов изучения конденсированных сред. При исследовании неоднородностей микрометрового размера в твердотельных образцах рассеяние обычно является многократным. Для его описания традиционно используется теория Мольер [1]. Область применимости этой теории очень высока, например, она активно используется в физике высоких энергий для описания рассеяния заряженных частиц [2,3]. Интенсивность МУР вычисляется по формуле Мольер

$$I_M(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{(2\pi)^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \exp\left(-N\left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{x})}{\sigma_i}\right)\right) d^2x, \quad (1)$$

$$\sigma(\mathbf{x}) = \int \frac{d^2q}{k^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \sigma(\mathbf{q}), \quad (2)$$

где N – кратность рассеяния, $\sigma(\mathbf{q}) = \sigma(q)$ – дифференциальное сечение для одного рассеивателя и полное сечение $\sigma_i = \sigma(\mathbf{x} = 0)$. За прошедшие годы было предложено несколько различных выводов формулы Мольер. Наиболее известен подход, основанный на применении кинетического уравнения [4]. Позднее было показано, что само кинетическое уравнение является точным следствием чисто квантовомеханического эйконального приближения при некоррелированном расположении рассеивателей [5,6]. Но при этом оставались вопросы, связанные с отделением рассеяния на образце в целом от нерассеянных частиц [6]. Они решены в данной работе. Показано, что когерентное рассеяние на всем образце, определяемое средней волновой функцией, в реалистической геометрии должно рассчитываться без приближения Фраунгофера. Оно некогерентно складывается с волной, рассеянной на неоднородностях и определяемой через амплитуду рассеяния. Этот анализ непосредственно обобщается на случай, когда корреляции в расположении рассеивающих центров существенны.

1. G. Moliere, Z. Naturforsch. 3a, 78 (1948)
2. T. Nakatsuka, J. Nishimura, Phys. Rev. E 78, 021136 (2008)
3. Tarasov, O. Voskresenskaya, arXiv:1204.3675v2 [hep-ph]
4. G. Bethe. Phys. Rev. 89, 1256 (1953)
5. А.И. Ахиезер, В.И.Трутенъ, С.Л. Фомин, Н.Ф. Шульга. ДАН СССР 249, 338 (1979)
6. Ф.С. Джебпаров, Д.В. Львов, Письма в ЖЭТФ 72, 518 (2000)

Расчет электронного спектра нанокластеров кремния

В.С. Батулин¹, С.В. Лепешкин¹, Н.Л. Мацко¹

¹*Физический институт имени П.Н.Лебедева РАН, Москва, Россия*

Создание новых полупроводниковых приборов на основе нанокластеров кремния, в том числе одноэлектронного транзистора - интенсивно развивающееся направление современного материаловедения. В связи с этим важной задачей является расчет электронной структуры исследуемого нанокластера, квазичастичных спектров объекта, его оптических свойств. В нашей работе методом функционала электронной плотности (DFT) была рассчитана энергия нанокластеров кремния $\text{Si}_{10}\text{H}_{2N}$ ($N=1\dots 11$), исследована их устойчивость, найдены конфигурации с наименьшей энергией и ближайшие метастабильные конфигурации. Были посчитаны полные и парциальные плотности электронных состояний. Однако вычисления методом DFT дают большую погрешность для значений энергетической щели в полупроводниках. Расчет электронной структуры методом Хартри-Фока не позволяет учитывать экранировку кулоновского взаимодействия, существенную для рассматриваемых систем. Поэтому помимо грубых расчетов с помощью DFT для правильного описания спектра электронных квазичастиц в работе рассматривается применение вычислений с помощью гибридного функционала, сочетающего в себе оба указанных метода. А также рассматривается использование приближения GW, являющегося значительно более точным по сравнению с уравнениями Кона-Шема.

Модель распределения намагниченности в инвертированных опалоподобных структурах, учитывающая «правило льда»

*А.А. Мистонов¹, Н.А. Григорьева¹, Н.А. Саполетова², К.С. Напольский²,
С.В. Григорьев^{1,3}*

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

²МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В работе исследована эволюция магнитной структуры геометрически фрустрированных трёхмерных ферромагнитных метаматериалов с изменением величины и направления внешнего магнитного поля \mathbf{H} . Метаматериалы были синтезированы на основе плёнок опалоподобных матриц, полученных из полистирольных шаров диаметром 550 нм, осажденных на подложку в гранецентрированную кубическую структуру (ГЦК). При этом кристаллографическая ось [111] ГЦК структуры ориентирована перпендикулярно плоскости пленки, а семейства осей типа $\langle 121 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ – в плоскости пленки. Ферромагнетики Ni, или Co, путем электрохимического осаждения из соответствующего раствора электролита, заполняли октаэдрические и тетраэдрические пустоты опалоподобной матрицы, образуя трехмерную сетку квазикубов и квазитетраэдров, поочередно соединенных вершинами вдоль 4-х кристаллографических осей $\langle 111 \rangle$. В зависимости от времени электрокристаллизации Ni или Co, были получены плёнки ферромагнитных инвертированных опалоподобных структур (ИОПС) толщиной от 1.5 до 11 мкм, унаследовавших структуру опаловой матрицы.

Модель пространственного распределения векторов локальной намагниченности \mathbf{M} в ферромагнитных ИОПС была построена на основе анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов с использованием «правила льда». Согласно последнему, число «вошедших» в структурный элемент (в данном случае куб или тетраэдр) векторов локальной намагниченности должно равняться числу «вышедших». Из полученных экспериментальных данных можно заключить, что вектора остаточной намагниченности \mathbf{M}_R в Ni(Co) ИОПС имеют неоднородное пространственное распределение и преимущественно ориентируются вдоль 4 направлений типа $\langle 111 \rangle$ ГЦК структуры. При величине \mathbf{H} порядка коэрцитивного H_C , не зависимо от его ориентации в плоскости пленки, образцы демонстрируют фрустрированное состояние вектора намагниченности, подобно хорошо известным фрустрированным магнетикам. При увеличении \mathbf{H} до насыщения и его ориентации вдоль осей типа $\langle 121 \rangle$ возникает перпендикулярная плёнке составляющая \mathbf{M} вдоль оси [111]. В то время как при ориентации \mathbf{H} вдоль осей типа $\langle 110 \rangle$ перпендикулярная компонента \mathbf{M} вдоль [111] отсутствует.

Работа выполнена при поддержке программы ДААД и СПбГУ «Дмитрий Менделеев» 2012 года, грантов НИР ФЦП «Кадры» №2012-1.2.1-12-000-1010-051 и РФФИ 12-02-12066-офи_м.

Коалесценция ансамбля пор и дислокационных петель в условиях радиационной генерации точечных дефектов

А.И. Рязанов¹, Т.И. Могилюк¹

¹ НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

Рассмотрена совместная коалесценция системы пор и дислокационных петель в кристалле вольфрама, в котором парами рождаются точечные дефекты. После завершения процесса флуктуативного зарождения и роста скоплений точечных дефектов начинается процесс растворения мелких скоплений и рост за счет их более крупных (коалесценция). На этой стадии процесса выяснена существенная роль межузельных атомов. Ввиду более сильного взаимодействия межузельных атомов с дислокационными петлями на них уходит больше межузельных атомов, чем вакансий. Оставшиеся в растворе межузельные атомы, частично подавляя вакансионные скопления, убыстряют уничтожение мелких пор и замедляют рост больших пор. Исследуется также коалесценция дислокационных петель в отсутствие пор при постоянной генерации точечных дефектов. Для этих случаев найдены асимптотики функции распределений скоплений точечных дефектов по размерам. С помощью этих функций получены их моменты: концентрации и средние радиусы пор и петель, выражение для суммарного объема пор (распухание материала), изменение дислокационной плотности за счет роста петель.

1. Рязанов А.И. – М., 1976 / Препринт ИАЭ

Исследование углеродных наносистем в модели Хаббарда

А.И. Мурзашев

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Главная особенность строения углеродных наносистем (УНС), фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) состоит в том, что углерод в них находится в sp^2 - гибрилизированном состоянии. Следовательно основные физические свойства УНС, оптические свойства и электропроводность, должны полностью определяться π -электронной подсистемой.

Несмотря на 30 лет с открытия не удалось добиться адекватного теоретического описания свойств УНС на основе этого факта. Из факта sp^2 -гибридизации, следует, что УНТ если разность индексов хиральности $n-m$ кратна трем должны быть металлами, и полупроводниками или диэлектриками в противном случае. Однако, эксперимент не выявляет такой корреляции. Это имеет место и при интерпретации оптических свойств фуллеренов. Так, исходя из свойств π -электронной подсистемы, не удастся объяснить спектры оптического поглощения фуллеренов, даже такого как C_{60} , который обладает высокой симметрией.

Все эти трудности, на наш взгляд, связаны с тем, что при теоретическом изучении УНС не учитывается кулоновское взаимодействие π -электронов на одном узле. А оно, как следует из [1], достигает значений ~ 10 eV. Нами в серии работ [2-7] для изучения УНС была предложена модель Хаббарда [2], в рамках которой удастся последовательно учесть внутриузельное кулоновское взаимодействие. В этих работах показано, что в УНС из-за сильного кулоновского взаимодействия, по всей видимости, реализуется т.н. сильно коррелированное состояние [9]. Из этого, в частности, следует что все УНТ, независимо от хиральности являются полупроводниками с щелью $\sim 0.05 \div 1.0$ eV. При таком подходе также удастся объяснить спектры оптического поглощения фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} и эндоэдрального фуллерена $Ca@C_{72}$.

Доклад посвящен изложению результатов наших работ [2-7], посвященных изучению УНС в рамках модели Хаббарда.

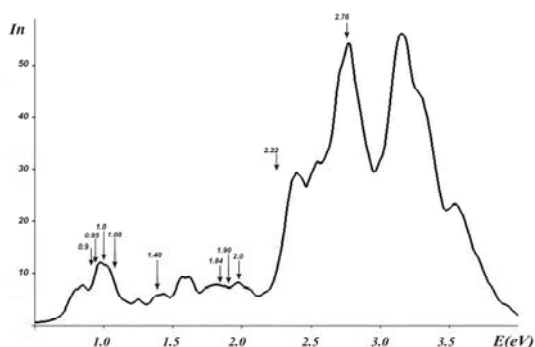
1. T.O. Wehling, E. Sasioglu, C. Friedrich, et al. Phys. Rev. Lett. **106**, 236805 (2011).
2. А.И. Мурзашев, ЖЭТФ **135**, 122 (2009).
3. Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. ФТТ **53**, 2273 (2011).
4. А.И. Мурзашев. Известия вузов, Физика, №5 с 49, 2012 г.
5. Т.Э. Арутюнова, Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. ФТТ **54**, 1797 (2012).
6. А.И. Мурзашев, Е.О. Шадрин. ФТТ **54**, 2176 (2012)
7. Б. Лобанов, А.И. Мурзашев. ФТТ **55**, 797 (2013).
8. J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
9. Ю.А. Изюмов. УФН **167**, 465, (1997).

Энергетический спектр и спектр оптического поглощения эндоэдрального фуллера $Ca@C_{72}$

А.И. Мурзаев, Т.Э. Назарова

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Для фуллеренов существует правило изолированных пятиугольников (ПИП), согласно которому в стабильных фуллеренах не может быть двух соседствующих между собой пятиугольников. Среди множества изомеров фуллера C_{72} существует всего лишь один, подчиняющийся этому правилу, он обладает группой симметрии D_{6d} . Этот фуллерен является неустойчивым, и



добавление в него атомов металла, в частности Ca , стабилизирует его. Однако некоторые исследователи [1] считают, что образованный в результате этого металлофуллерен $Ca@C_{72}$ не подчиняется ПИП.

С целью ответить на этот вопрос нами следуя [2-4] в рамках модели Хаббарда [5] был получен энергетический спектр $Ca@C_{72}$, в качестве фуллереновой основы которого был взят

подчиняющийся ПИП изомер C_{72} симметрии D_{6d} , и на его основе рассчитан спектр оптического поглощения, приведенный на рисунке. Стрелочками указаны пики наблюдаемые в эксперименте [6]. Видно, что в области энергий меньше 3 eV наблюдается достаточное хорошее совпадение пиков поглощения. Незначительные (~ 0.1 eV) отклонения от экспериментальных данных могут быть объяснены влияниями фононных мод, которые в рамках методики [2-4] не учитываются. Пик при 3.2 eV полученный в нашем расчете, скорее всего в [1] не был обнаружен потому как измерения проводились при длинах волн больших 400 нм (3.2 eV).

Таким образом, наш расчет показывает оптические спектры $Ca@C_{72}$ могут быть описаны в рамках модели Хаббарда чисто электронными переходами. При этом, согласно нашим расчетам $Ca@C_{72}$ в качестве основы имеет подчиняющийся ПИП изомер C_{72} симметрии D_{6d} .

1. Z.Slanina, K.Kobayashi, S.Nagase. Chem. Phys.Lett. 372, 810 (2003).
2. Мурзаев А.И. ЖТФЭ. 135, 1 (2009).
3. Г.И. Миронов, А.И. Мурзаев. ФТТ **53**, 2273 (2011).
4. А.И. Мурзаев. Известия вузов, Физика, №5 с 49, 2012 г.
5. J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
6. Kamat P.V., Guldi D.M., Kadish K.M. FULLERENS:Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials. The Electrochemical Society. New Jersey: Inc. Pennington, 1999. 795 p.

Релятивистская полуклассическая теория спинового света

В.А.Бордовицын¹, Е.А.Немченко¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

Спиновый свет – это излучение собственного магнитного момента нейтральных или заряженных элементарных частиц. Сейчас установлено, что для нейтронов в однородном магнитном поле классическая и квантовая теория излучения несмотря на все принципиальные различия в методах описания спинового света дают совершенно одинаковые результаты. Для электронов такое согласие возможно только в ультрарелятивистском случае, когда вступают в силу законы релятивистской полуклассической теории излучения, согласно которой траекторные свойства частиц описываются классической теорией, а квантовые эффекты при излучении – квантовой электродинамикой. При этом все физические явления, связанные с излучением, в релятивистской полуклассической теории излучения в отличие от более строгой квантовой теории получают весьма наглядную физическую интерпретацию при полном совпадении количественных результатов.

В данном докладе полуклассическая теория спинового света рассматривается в первом приближении по постоянной Планка для релятивистских электронов, движущихся в однородном магнитном поле. Получено спектрально-угловое, угловое и спектральное распределения излучения. Показано, что все интегральные характеристики этого излучения полностью согласуются с квантовой теорией. Но здесь впервые выясняется роль ларморовской и томасовской прецессии спина. Установлено, в частности, что отсутствие линейной поляризации излучения в плоскости, перпендикулярной плоскости орбиты электрона, обусловлено тем, что оба типа прецессии спина в пренебрежении аномальным магнитным моментом электрона полностью компенсируют друг друга. Элементарное объяснение получает также и тот факт, что в рассматриваемом приближении связанные с излучением квантовые переходы и эффекты отдачи при излучении происходят исключительно без переверота спина.

1. В.А.Бордовицын, И.М.Тернов, В.Г.Багров, УФН. 165, №9, 1083 (1995).
2. Теория излучения релятивистских частиц. Под ред. В.А.Бордовицына, М.: Физматлит, 2002.
3. V.A.Bordovitsyn, O.A.Konstantinova, J. Phys. Conf. Ser., 295, 01217 (2011); Ibid. 357, 012007 (2011); Proc. DSPIN-11, Dubna, 93 (2011).

Критические индексы двумерных систем и псевдо- ε -разложение

М.А. Никитина, А.И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Целью работы является вычисление критических индексов и координат вильсоновской фиксированной точки двумерных моделей фазовых переходов методом псевдо- ε -разложения. За основу взяты найденные ранее пятипетлевые ренормгрупповые разложения [1,2] для евклидовой теории с гамильтонианом

$$H = \int d^2x \left[\frac{1}{2} (m_0^2 \phi_\alpha^2 + (\nabla \phi_\alpha)^2 + \frac{\lambda}{4!} (\phi_\alpha^2)^2) \right]. \quad (1)$$

При $n = -1, 0, 1$ и некоторых дробных значениях n , сходящихся к точке $n = 2$, критические индексы решеточных аналогов модели (1) известны точно [3]. Это позволяет использовать ее как полигон для оценки эффективности метода ренормгруппы и техники псевдо- ε -разложения в задачах данного типа.

Мы детально проанализировали случаи $n = -1, 0, 1$, которые отвечают физически реализуемым системам. Так, при $n = 0$ псевдо- ε -разложения для критического индекса γ и координаты фиксированной точки g^* имеют вид:

$$\begin{aligned} \gamma &= 1 + \tau/4 + 0.1432423 \tau^2 + 0.0182726 \tau^3 + 0.0352511 \tau^4 - 0.0634415 \tau^5, \\ g^* &= \tau + 0.7449227 \tau^2 + 0.0856466 \tau^3 + 0.1054739 \tau^4 - 0.2821758 \tau^5. \end{aligned} \quad (2)$$

Коэффициенты при младших степенях τ в этих рядах быстро убывают. Прямое суммирование первого из них с обрывом на оптимальном (наименьшем при $\tau = 1$) члене дает значение индекса γ , лишь на 5% отличающееся от точного. При

$n = -1$ и $n = 1$ это отличие еще меньше – 3% и 1% [4]. Столь же благоприятной оказывается ситуация с зарядом g^* и критическим индексом ν . При этом в случае использования прямого суммирования наиболее надежные числа дают псевдо- ε -разложения самих индексов γ и ν , а не их обратных значений.

К сожалению, попытки рассчитать теми же методами индекс Фишера η и другие малые индексы не привели к позитивным результатам. Ряды для $\eta(\tau)$, знакопостоянны, и их коэффициенты не имеют выраженной тенденции к убыванию. Хотя прямое суммирование здесь выглядит вполне естественным, оно дает оценки, чуть не вдвое отличающиеся от точных значений. Улучшить положение мог бы учет членов следующего порядка (шестипетлевых), однако трудно сказать, насколько радикальным было бы такое улучшение.

1. Е. В. Орлов, А. И. Соколов, ФТТ 42, 2087 (2000).
2. P. Calabrese, E. V. Orlov et al., Phys. Rev. B 70, 094425 (2004).
3. B. Nienhuis, Phys.Rev.Lett. 49, 1062 (1982); D. Friedan et al. Phys.Rev.Lett. 52, 1575 (1984).
4. А. И. Соколов, ФТТ 47, 2056 (2005).

Эффект Бормана при резонансной дифракции рентгеновского синхротронного излучения в гранатах

А.П. Орешко

МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

Резонансная (при энергии падающего излучения близкой к энергии края поглощения какого-либо элемента, входящего в состав исследуемого вещества) дифракция рентгеновского излучения является интенсивно развивающимся методом изучения свойств кристаллов [1].

Так как вблизи краев поглощения величина коэффициента поглощения резко увеличивается и, тем самым, уменьшается глубина проникновения излучения в вещество, для интерпретации полученных экспериментальных данных по резонансной дифракции используется кинематическое приближение теории дифракции. Однако, экспериментальное наблюдение [2] динамического эффекта Бормана потребовало последовательного развития динамической теории резонансной дифракции.

В настоящей работе на основе предложенного в [3, 4] подхода развивается динамическая теория резонансной дифракции рентгеновского синхротронного излучения в двухволновом приближении в компланарной геометрии Лауэ при больших углах скольжения в совершенных кристаллах. Показано резкое уменьшение коэффициента поглощения в веществе при одновременном выполнении условий дифракции (эффект Бормана) и проводится сопоставление теоретических вычислений и первых экспериментальных результатов на примере кристаллов железо-иттриевого и гадолиний-галлиевого гранатов.

На основе проведенных вычислений можно говорить о том, что эффект Бормана в резонансной дифракции рентгеновского излучения – мощный инструмент для исследования природы предкраевых пиков в ближней тонкой структуре края поглощения рентгеновских лучей (*XANES*). Так как квадрупольный вклад в общий коэффициент поглощения увеличивается в спектрах поглощения по Борману, этот способ выигрывает по сравнению со способами, где предлагается проводить сравнение слабых пиков в традиционных спектрах *XANES*.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 12-02-00924-а и 13-02-00760-а).

Вычисления выполнены на суперкомпьютерном комплексе СКИФ МГУ.

1. V.E.Dmitrienko, K.Ishida, A.Kirfe, E.N.Ovchinnikova, Acta Cryst. A61, 481 (2005).
2. R.F.Pettifer, S.P.Collins, D.Laundy, Nature. 454, 196 (2008).
3. А.П.Орешко, Вестник Московского ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия. 3, 55 (2007).
4. А.П.Орешко, Кристаллография (2013) (в печати).

Роль электронных корреляций в ВТСП системе $K_xFe_{2-y}Se_2$: LDA'+DMFT

Н.С. Павлов¹, И.А. Некрасов¹, М.В. Садовский^{1, 2}

¹ Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Физические свойства высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) $K_xFe_{2-y}Se_2$ интенсивно изучают в современной физике твёрдого тела. Экспериментально получаемые кристаллы обладают достаточно большой степенью дырочного легирования, и приготовление образцов близких к стехиометрическому составу затруднено. В данной работе изучены электронные свойства соединения $K_xFe_{2-y}Se_2$ при различной степени дырочного легирования. Для учёта корреляционных взаимодействий в подрешётке железа, важных при описании физических свойств данных систем, использованы LDA+DMFT [1] и LDA'+DMFT [2] подходы, объединяющие теорию функционала электронной плотности в приближении локальной электронной плотности DFT/LDA и теорию динамического среднего поля DMFT.

Для четырёх выбранных степеней дырочного легирования, одна из которых соответствует стехиометрическому составу KFe_2Se_2 , рассчитаны спектральные функции в симметричных направлениях зоны Бриллюэна и плотности состояний. Во всех расчётах обнаружено, что $K_xFe_{2-y}Se_2$ является плохим металлом: в плотности состояний имеется глубокий провал на уровне Ферми. Это связано с тем, что в данной системе на уровне Ферми находятся только Fe-3d состояния, которые сильно перенормируются корреляционными эффектами в интервале от -0.4 до 0.4 эВ. Обнаружено, что с возрастанием степени легирования в среднем увеличивается величина квазичастичной массы m^*/m от ~ 1 (KFe_2Se_2) до ~ 5 ($K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$). Показано, что различные Fe-3d орбитали имеют отличающиеся друг от друга эффективные массы.

Результаты расчётов $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ состава позволили объяснить фотоэмиссионный спектр с угловым разрешением ARPES [3].

1. K. Held, et al., in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, (Eds. J. Grotendorst, D. Marks, A. Muramatsu) NIC Series Volume 10, 175 (2002) (arXiv:cond-mat/0112079v1).
2. I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, M.V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ 95, 659 (2012), (arXiv:1204.2361); ЖЭТФ, принята в печать (arXiv:1208.4732).
3. I.A. Nekrasov, N.S. Pavlov, M.V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ 97, 18 (2013), (arXiv:1211.3499).

Релятивистская ядерная поправка к магнитному моменту дейтрона в формализме светового конуса

Ф.Ф. Павлов¹

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

Рассматривается техника расчета релятивистской ядерной поправки к магнитному моменту дейтрона в переменных светового конуса. Получено релятивистское выражение для магнитного момента дейтрона в аналитическом виде и его численное значение, оценены нетривиальные релятивистские эффекты. Дейтрон рассматривается как суперпозиция двухнуклонных фоковских состояний с инвариантной массой, зависящей от относительного импульса протон-нейтронной пары.

Для достижения результата используются развитые ранее методы релятивистской теории поля в переменных светового конуса. Техника светового конуса обычно используется в физике высоких энергий для выделения ведущего вклада в разложении амплитуды рассеяния по обратным степеням энергии.

Вклад релятивистской поправки дает хорошее объяснение различию между экспериментальным и теоретическим значениями магнитного момента. В качестве волновой функции дейтрона использовалась нерелятивистская волновая функция; но можно предположить, что при рассмотрении волновой функции дейтрона, описывающей малые межнуклонные расстояния, при которых будут проявляться вклады, обусловленные кварк-глюонной структурой нуклона, релятивистская поправка даст еще более хорошее согласие с экспериментальным значением магнитного момента. Тем не менее, в качестве начального приближения предполагалось оценивать релятивистские эффекты, используя современные реалистические волновые функции.

1. F. F. Pavlov, JETP 114, 946 (2012) [ЖЭТФ 141, 1084 (2012)];
2. I. P. Ivanov, hep-ph/9909394;
3. S. J. Brodsky, P. Hans-Christian, S. S. Pinsky, Phys. Rep. 301, 229 (1998);
4. G. P. Lepage, S. J. Brodsky, Phys. Rev. D 22, 2157 (1980);
5. H. M. Choi, C. R. Ji, Phys. Rev. D 70, 053015 (2004);
6. Л. А. Кондратюк, М. И. Стрикман, ЯФ 37, 1337 (1983);
7. I. L. Grach, L. A. Kondratyuk, Sov. J. Nucl. Phys. 39, 198 (1984) [ЯФ 39, 316 (1984)];
8. L. A. Kondratyuk, M. I. Strikman, Nucl. Phys. A 426, 575 (1984);
9. Л. А. Кондратюк, М. Ж. Шматиков, Матер. XVIII Зимней школы ЛИЯФ. Физика атомного ядра. Т. 18, Ч. 3, 1983, с. 107.

FTIR study of adsorption and transformations of HCN on oxide adsorbents

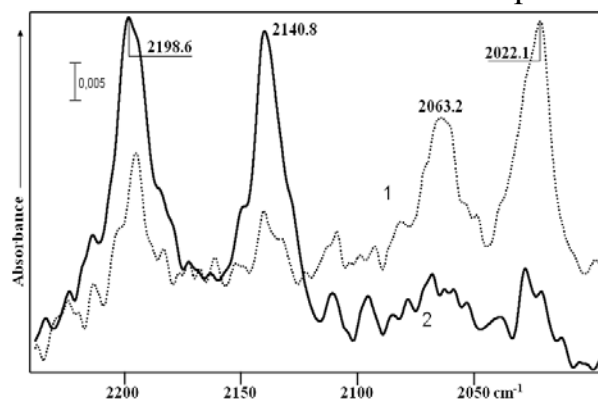
S.N. Petrov¹, A.A. Tsyganenko¹, A.V. Rudakova¹, K.S. Smirnov²

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

²*University of Sciences and Technologies, Lille, France*

In spite of a great importance of HCN for organic synthesis, the mechanism of its adsorption and transformations on the surface of oxide catalysts is far of being understood. It has been shown earlier that ¹³C- and ¹⁵N- isotopic substitution can be helpful to distinguish the products of HCN dissociation on silica [1] and alumina [2], while DCN adsorption enables us to clarify the structure of molecular complexes of hydrogen cyanide [2, 3]. In the present work isotopic substitution was used to determine the forms of HCN adsorption on TiO₂, γ-Al₂O₃ and MgO. Experimental results we compared with calculated isotopic shifts for model structures.

Spectra of adsorbed DCN enable us to distinguish between the bands of molecular adsorption and those of dissociation products. Using of ¹³C and ¹⁵N substitution, we have proved that coordinately adsorbed on TiO₂ and γ-Al₂O₃ cyanide has HCN configuration, but not isomeric HNC form. Both quantum mechanical calculation and normal coordinate analysis of a model system show that C- and N-bonded forms of CN⁻ ion should have deviations in the isotopic shifts on ¹³C and ¹⁵N substitution from the value predicted of the reduced mass ratios. This was used for band assignment in the spectra of dissociated HCN.



Spectra of adsorbed H¹³CN on MgO are shown in the figure. Bands at 2063.2 and 2022.1 cm⁻¹ (curve 1) are the first to appear after heating the sample with adsorbed isotopic mixture above room temperature. Their separation is about 2 cm⁻¹ smaller than follows from the reduced masses, while for the 2198.6 and 2140.8 cm⁻¹ bands, growing on further heating (curve 2) or higher, on the contrary, the shift is about 10 cm⁻¹ above the predicted value. This means that HCN dissociation first leads to N-bonded CN⁻ ions with further isomeric transition to C-bonded form. Analogous results, obtained for alumina, are in accordance with the earlier interpretation [2].

1. Morrow, B.A.; Cody, I.A. J. Chem. Soc., Faraday Trans.1 1975, 71, 1021.
2. Kim, J. Sunhee; Sorescu, D.C.; Yates, J. T. J. Phys. Chem. C, 2007, 111, 5416.
3. Tsyganenko, A. A.; Chizhik, A. M.; Chizhik, A. I. PCCP. 12 2010, 6387-6395.

Численное моделирование гетеродиффузии примеси из источника переменного типа

В.В. Волков, А.В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

В реальных условиях в случае наличия ограниченной растворимости диффузия из тонких плёнок в материал подложки (матрица диффузии) осуществляется в несколько стадий, в которых источник диффузии постепенно трансформируется от «постоянного» типа к «мгновенному» через промежуточные стадии.

Выполнено численное моделирование диффузии примеси из слоя конечной толщины при наличии ограниченной растворимости в матрице с учетом концентрационной зависимости коэффициента диффузии. В основе алгоритма моделирования лежит сравнение среднего состава слоя в произвольный момент времени с уровнем предела растворимости при данной температуре. Получены концентрационные распределения примеси в матрице растворителя и соответствующие им угловые распределения интенсивности дифракционной рентгеновской линии матрицы [1] на любой временной стадии диффузионного эксперимента.

Результаты показали, что при средних временах диффузии концентрационные профили существенно отличаются от аналитических решений для идеальных источников типа «постоянный» источник и «бесконечно тонкий слой» [2]. Моделирование позволяет оперативно устанавливать тип действующего источника диффузии, оценивать роль концентрационной зависимости коэффициента диффузии, а также неразрушающим способом контролировать процессы диффузионного насыщения матрицы, например, таких как эволюцию структурных свойств омических контактов, азотирование, цементация и т.д.

1. Б.Я. Пинес, Э.Ф. Чайковский. Доклады Академии наук СССР **1235**, 6 (1956).
2. Р.Ш. Малкович. Математика диффузии в полупроводниках (СПб, Наука, 1999).

Симметрии и интегрируемые системы Модели типа «реакция-дрейф-диффузия»

В.Н. Робук

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины, Харьков, Украина

Изучение многокомпонентных конденсированных сред требует применения математических моделей, описывающих динамику взаимосвязанных параметров таких как, например, концентрации вакансий и междоузельных атомов, температуру электронной и ионной подсистем, концентрации носителей заряда, динамику образования устойчивых локальных неоднородностей. Именно благодаря точному (аналитическому) описанию поведения многокомпонентной среды, можно определить области параметров среды и начальных условий, при которых проявятся те или иные качественно различные состояния, поскольку параметры среды и начальные условия будут представлены в решении модели свободными параметрами, а не конкретными числами. В этом плане представляется целесообразным обратиться к математическому аппарату точного интегрирования нелинейных моделей типа «реакция-дрейф-диффузия» (модели РДД) для многокомпонентных сред.

В частности, при определённых ограничениях на параметры, нелинейные модели РДД допускают линеаризацию с помощью матричного аналога [1] подстановки Коула-Хопфа для уравнения Бюргерса. В этом случае **нелинейную** систему уравнений в частных производных можно свести, путём обратимой замены динамических переменных, к **линейной** системе уравнений в частных производных. Помимо универсального метода [2,3] решения этих линейных систем существует и частный, но более эффективный для получения отдельных классов решений, метод операторов симметрий, которому уделено должное внимание.

Весь материал (и его изложение), представленный в настоящем сообщении, адресован, в первую очередь, исследователям в области физики конденсированных сред, нуждающимся в простом и эффективном наборе методов, приёмов и формул для построения аналитических решений соответствующих линейных и нелинейных моделей математической физики.

1. А.Е.Боровик, В.Ю.Попков, В.Н.Робук, «Образование нелинейных структур в точно решаемых диссипативных системах», ДАН СССР, т.305, № 4, стр.841-843, (1989)
2. V.N.Robuk, «A constructive formula for function of matrix. Alternative to the Lagrange-Sylvester formula.», Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A., Volume 534, Issues 1-2, 21, pp. 319-323, (November 2004)
3. Робук В. Н., Рихвицкий В. С., «Об одном классе аналитических решений для двухкомпонентных моделей типа "реакция-дрейф-диффузия"», Scientific report LIT JINR, Изд.: JINR, Dubna, стр. 196-198, (2008-2009)

Особенности динамики локализованных электронных квантовых состояний в проводящих углеродных нанотрубках

M.J. Majid¹, С.С. Савинский²

¹ *University of Basrah, Basrah, Iraq*

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

В длинноволновом приближении $ak_0 \leq 1$, где a – межатомное расстояние в углеродной нанотрубке, k_0 – несущий волновой вектор рассматривается задача эволюции волновых пакетов с использованием модельного электронного гамильтониана Ando [1]. Показано, для волновых пакетов в проводящих нанотрубках может иметь место сложная динамика связанная с интерференцией состояний валентной зоны и зоны проводимости. Интерференция квантовых состояний валентной и проводящих зон электронного спектра приводит к осциллирующим зависимостям средних значений координат и скоростей электрона известная в литературе как явление Zitterbewegung (ZBW), теоретически изученная в ряде работ применительно к графену и двумерным полупроводниковым структурам (см. обзор [2]).

Сходность явлений ZBW в графене и проводящей углеродной нанотрубке связана с особенностями электронного спектра и «наследованием» электронных свойств углеродной нанотрубки от электронных свойств графена. Факт наследования электронных свойств имеет геометрическую интерпретацию: углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания графенового листа. Отличие явлений ZBW в углеродной нанотрубке и графене обусловлено квантованием поперечной компоненты импульса электрона при сворачивании графенового листа, также различной размерностью: графен двухмерный объект, углеродная нанотрубка - квазиодномерный объект.

В докладе аналитически показана возможность существования явлений ZBW для локализованных квантовых состояний электрона на поверхности проводящей углеродной нанотрубки. Рассмотренные в докладе квантовые волновые пакеты построены из состояний валентной и проводящих зон электронного спектра, явление ZBW возможны только в данной ситуации. Приведенные оценки для частот и амплитуд ZBW в углеродной нанотрубке могут быть использованы для их экспериментальной идентификации.

1. T.Ando, J.Phys.Soc.Jpn., V74, 777 (2005).

2. W.Zawadzki , T.M.Rusin, J. Phys.: Condens. Matter, 23,143201 (2011).

Спиновые нематерики в системах без фрустрации в магнитном поле

А.В. Сизанов¹, А.В. Сыромятников^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

Спиновые нематерики обычно обнаруживают в системах с фрустрацией или большими не гейзенберговскими взаимодействиями такими как круговой обмен. Фрустрации приводят к притяжению магнов и образованию связанных двух- и много-магнонных состояний. Если энергия связанного состояния лежит достаточно низко оно становится неустойчивым. Это приводит к конденсации таких возбуждений т.е. образованию спиновой нематерики (квадру- или мульти-польной) фазы. Авторами показано, что к притяжению магнов может приводить также и анизотропия в системах без фрустрации. Исследованы следующие системы:

0. цепочка с переменным обменом и анизотропией на ферромагнитных узлах, $S=1/2$

1. антиферромагнитная лестница с анизотропными ферромагнитными связями на перекладинах, $S=1/2$

2. антиферромагнитный бислои с анизотропными ферромагнитным обменом между слоями, $S=1/2$

3. аксиально-симметричная система на трёхмерной прямоугольной решётке (в том числе предельные случаи - цепочка и плоскость) с одноионной анизотропией типа “лёгкая ось” и любыми обментами вдоль выделенной оси и в перпендикулярной плоскости. $S=1$.

В сильном поле найдены аналитические выражения для спектра связанных состояний и области параметров, при которых они существуют. Найдено, что энергия этих состояний при понижении поля обращается в ноль раньше энергии одномагнонных состояний. Таким образом в найденных областях параметров при понижении поля система будет переходить в фазу не с дальним магнитным порядком (в плоскости ортогональной выделенной оси), а с дальним нематерики порядком. В одномерных системах будет образовываться квазиконденсат связанных состояний и характерная одномерная нематерики фаза без дальнего порядка.

Для одномерных систем дополнительно проведено численное исследование методом точной диагонализации. Показано, что теоретические предсказания вблизи поля насыщения с хорошей точностью описывают полученные численные данные. Также получена фазовая диаграмма одномерных систем на плоскости анизотропия - магнитное поле.

Теоретическое исследование электронной структуры кристаллов для поиска эффектов нарушения P, T-симметрий

Л.В. Скрипников^{1,2}, А.В. Титов^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

Одной из наиболее актуальных проблем современной физики является поиск эффектов нарушения пространственной и временной симметрий – перманентного электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона и нейтрона, шиффовского момента ядра атома и др. Так, наблюдение величины ЭДМ электрона на уровне, существенно большем, чем 10^{-38} будет свидетельствовать о наличии “новой физики” за рамками Стандартной модели [1]. К настоящему моменту наиболее жёсткие ограничения на величину ЭДМ электрона были получены в экспериментах на пучках тяжёлых атомов и молекул. Однако недавно был выполнен эксперимент по поиску ЭДМ электрона в кристалле $\text{Eu}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{TiO}_3$ [2]. Для интерпретации данных этих экспериментов в терминах ЭДМ электрона или шиффовского момента ядра необходимо знать величину внутреннего эффективного поля (E_{eff}), которое не может быть измерено экспериментально и является задачей чисто теоретического исследования. Сложность таких исследований заключается в необходимости одновременного учёта, как релятивистских эффектов, так и эффектов электронной корреляции. Ранее нашей и другими группами были разработаны и применены методы расчёта эффективных полей в атомах и (двухатомных) молекулах. Однако к настоящему моменту не выполнено ни одного непосредственно твердотельного расчёта E_{eff} кристаллов из-за существенно большей сложности таких вычислений по сравнению с молекулярными. Имеется лишь ряд работ, в которых рассмотрены приближенные модели (одноатомные или кластерные). В настоящей работе предлагается новый подход к вычислению E_{eff} в кристаллах. Он основан на двухшаговой концепции расчёта основных свойств с использованием обобщённого релятивистского потенциала остова [3]. Предложенный подход применён к вычислению эффективного поля в ряде перовскитных структур типа PbTiO_3 . Результаты сравниваются с данными предыдущих модельных расчётов. Предложенный подход может быть использован для расчёта других основных свойств, таких, как параметры сверхтонкой структуры, химические сдвиги рентгеновских и мессбауэровских линий и др. в кристаллах.

*ЛС благодарит за поддержку фонд Дмитрия Зимина “Династия”.
Работа поддержана грантом РФФИ 13-03-01307.*

1. E. D. Commins, Adv. At. Mol. Opt. Phys. 40, 1 (1998);
2. S. Eckel, A.O. Sushkov, S.K. Lamoreaux Phys. Rev. Lett. 109, 193003 (2012)
3. A.V. Titov, N.S. Mosyagin, A.N. Petrov, T.A. Isaev, D.P. DeMille, Progr. Theor. Chem. Phys. B 15, 253 (2006).

Переход первого рода в модели $O(3)$ киральных полей в трех измерениях: непертурбативный подход

А.О. Сорокин

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

С помощью непертурбативной ренормгруппы исследуется критическая точка модели $O(3)$ главных киральных полей. В данной модели параметр порядка представляется в виде вещественной квадратной матрицы размера 3 и описывает фазу с полностью нарушенной $O(3)$ симметрией. Этот сценарий нарушения симметрии происходит, например, во фрустрированных магнитных системах с непланарным спиновым упорядочением (в частности, в соединениях со структурой пирохлора $Gd_2Ti_2O_7$, $Gd_2Sn_2O_7$ и др.), а также в системах с двумя киральными параметрами порядка [1].

Для исследования использовалось разложение по производным в качестве аппроксимации уравнений Вильсона-Полчинского. Найдено [2], что притягивающая неподвижная точка отсутствует на РГ-диаграмме, что соответствует индуцированному флуктуациями переходу первого рода. Однако здесь имеется относительно узкая область, через которую проходят РГ-траектории, стартующие с широкого диапазона начальных данных, и в которой скорость РГ-потока значительно уменьшается.

Малая скорость РГ-потока в найденной области объясняет имитацию скейлинга, наблюдавшуюся в некоторых системах из этого класса [1, 3, 4]. В то же время, малый размер найденной области, а также ее аттракторный характер объясняет (псевдо)универсальность критических показателей.

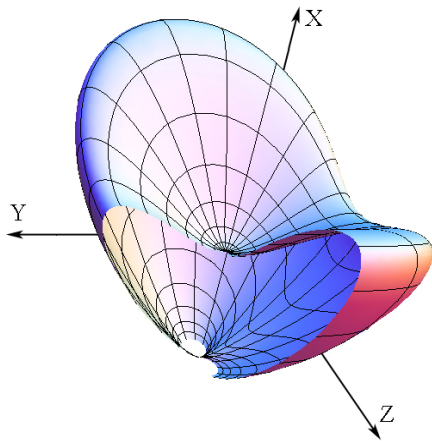
1. А.О. Сорокин, А.В. Сыромятников, ЖЭТФ **139**, 1147 (2011).
2. А.О. Сорокин, в печати.
3. Н. Kunz, G. Zumbach, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 3121 (1993).
4. J.N. Reimers, J.E. Greedan, and M. Björgvinsson, Phys. Rev. B **45**, 7295 (1992).

Излучение атомной цепочки, возбужденной каналирующей частицей

М.А. Соседова, В.Я. Энн

Томский государственный педагогический университет, Томск, Россия

Каналирование ускоренных частиц исследовано довольно подробно как теоретически, так и экспериментально. В процессе взаимодействия каналирующей частицы с кристаллом генерируется электромагнитное излучение. В рамках классической электродинамики это излучение можно представить как излучение из разных источников, например, детально исследованное во многих статьях и учебниках излучение частицы [1], излучение электронного газа (кильватерный след) [2] и менее изученное, излучение возбужденных атомов кристаллической решетки. Теоретическое исследование излучения атомных цепочек кристалла, возбужденных релятивистской каналирующей частицей представляет интерес с точки зрения экспериментальной проверки предсказанных эффектов.



При каналировании, заряженная частица передает часть ее поперечного импульса окружающим атомам, следовательно, происходит возбуждение колебаний атомных цепочек. Но фазы колебаний атомов коррелируют между собой, поскольку колебания возбуждены одной и той же каналирующей частицей. Поэтому излучение следует рассматривать как когерентное. В данной работе рассмотрены основные свойства излучения атомных цепочек, возбужденных каналирующей частицей. В частности, угловое распределение интенсивности излучения имеет вид:

$$\frac{dI}{d\Omega} = \frac{q_1^2 q_2^4 K^2 \sin^2 \theta}{2\pi m^2 b^2 c^3 D^4 (1 - \beta n_x)^2} \frac{(\alpha^2 + \omega^2)^2 + 4\Omega^2 \alpha^2}{(\alpha^2 - \omega^2 + \Omega^2)^2 + 4\alpha^2 \omega^2}.$$

Наличие в знаменателе этой формулы фактора $(1 - \beta n_x)$ приводит к тому, что в случае релятивистской каналирующей частицы основная часть излучения атомов генерируется в направлении скорости частицы. Таким образом, частота излучения и угловое распределение оказываются близкими к соответствующим характеристикам излучения самой каналирующей частицы.

Исследованное излучение может быть использовано для изучения физических свойств кристалла.

1. J. Lindhard, Phys. Lett. 12, 126 (1964)
2. S.V. Shchelkunov et al, Phys. Rev. 9, 011301 (2006)

Исследование взаимодействия собственного магнитного поля сверхпроводящего кольца с током с помощью дискретного моделирования

Л.А. Суворова, А.Р. Буев

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Рассчитываются магнитное поле типичного ВТСП кольца, используемого в экспериментах [1-3]. СП-ток возбуждается индуктивно путем введения в кольцо внешнего магнитного потока с помощью длинного соленоида с током. Величина наведенного СП-тока при этом пропорциональна коэффициенту самоиндукции L ВТСП кольца. Для вычисления L необходим расчет магнитного поля кольца реальных размеров прямоугольного поперечного сечения, сравнимого по размерам с радиусом кольца. Известна формула для магнитного поля бесконечно тонкого кольца с током. Для перехода к полю реального кольца необходимо вычисление тройного интеграла от этой формулы по его объему, которое не точно не выполнимо. Обычно эта задача решается численно, и результат представляется в виде числового массива, что оказывается очень неудобным при дальнейших вычислениях использованием найденного магнитного поля.

В данной работе используется новый способ (аналогов не найдено) создания дискретной модели. Дискретная модель представляет собой регулярный набор идеальных колец, заполняющих объем реального кольца. Вследствие аддитивности реальное магнитное поле в этом случае представляется в виде суммы полей от каждого из идеальных колец. Точность решения задачи при этом зависит только от числа идеальных колец или от шага заполнения $d \approx \sqrt{S/N}$ (S – поперечное сечение кольца, N – число заполнения). Величина N ограничена лишь мощностью компьютера и в данной работе находится на уровне 400-600 тысяч, $d \approx 3 \cdot 10^{-3}$ мм. Для решения этой задачи используется современный численный метод (символьная алгебра) Wolfram Mathematica 9.0.0, преимуществом которого является то, что результаты расчета представляются в аналитическом виде. Это позволяет вычислить магнитный поток через площадь кольца (включая площадь поперечного сечения), т.е. искомый коэффициент самоиндукции.

1. Л.А. Суворова, А.Р. Буев. Известия высших учебных заведений. Поволжский регион (Физико-математические науки). 3, 102 (2010).
2. А.Р. Буев. Известия вузов. Поволжский регион. 5, 98 (2004).
3. А.Р. Буев. Способ бесконтактного измерения тока ВТСП и устройство для его реализации. Патент Российского агентства по патентам и товарным знакам РФ на изобретение. № 2244317 от 02.12.2002. БИ №1, 2005.

Структурные превращения в молибдене при высоких давлениях.

О.М. Красильников¹, Т.Р. Таишулатов¹, А.В. Луговской¹, Н.Г. Бондаренко²

¹ Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС», Москва, Россия

² Uppsala Universitet, Уппсала, Швеция

В рамках теории фазовых переходов Ландау была построена теоретическая модель, описывающая деформационный фазовый переход в молибдене. Деформационные фазовые переходы наблюдаются в случае спонтанной потери устойчивости решетки по отношению к конечным деформациям, когда величина деформации сравнима по порядку величины с упругими модулями кристалла. В результате, происходит переход в спонтанно-деформированное состояние, и симметрия новой фазы становится ниже, чем симметрия исходной фазы. Были рассчитаны уравнения состояния металла, фононной дисперсии и упругие постоянные второго, третьего и четвертого порядков в широком диапазоне давлений, в рамках теории функционала электронной плотности. В ОЦК молибдене упругая постоянная $(C^{11}-C^{12})/2$ испытывает сильное смягчение при давлении свыше 600 ГПа. При достижении давления около 1050 ГПа это смягчение приводит к появлению мнимых частот, что говорит нам о том, что примерно при 1050 ГПа возникает динамическая неустойчивость, и структура ОЦК должна перестроиться. Возможность упругого фазового перехода в кристалле молибдена из ОЦК структуры в тетрагональную (ромбическую) структуру обсуждается. Мы показали хорошее согласие результатов проведенных нами расчетов с имеющимися экспериментальными данными.

Химические сдвиги рентгеновских спектров молекул и твердых тел и новый метод описания состояния атомов в соединении

А.В. Титов, Ю.В. Ломачук, Л.В. Скрипников, Н.С. Мосягин, А.В. Зайцевский

*Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Возможности рентгеновской эмиссионной спектроскопии в качестве уникального неразрушающего метода контроля физико-химического состояния атомов актиноидов, лантаноидов и переходных металлов в объеме образца ограничены, прежде всего, трудностью интерпретации экспериментальных данных. Перспективность установления связи между измеряемым спектром и состоянием атома в соединении путем прямого моделирования электронной структуры и спектров весьма очевидна. Однако такой подход до сих пор не получил широкого распространения как из-за чрезвычайной трудоемкости традиционных схем релятивистских расчетов твердых тел и других сложных объектов, так и из-за численной неустойчивости оценок величин химических сдвигов, небольших по сравнению с энергией рентгеновских переходов. Нами предложен эффективный метод определения химических сдвигов [1] путем расчета электронной структуры химических соединений с использованием релятивистского псевдопотенциала [2] и процедур апостериорного восстановления волновых функций вблизи атомных ядер [3].

Основное преимущество этого метода заключается в полностью релятивистском (четырёхкомпонентном) описании основных оболочек, между которыми происходит рентгеновский переход, достигаемом на основе двухкомпонентного (с учетом зависящих от спина взаимодействий) или даже однокомпонентного (скалярно-релятивистского) расчета электронной структуры соединений с явным рассмотрением только валентных и субвалентных оболочек.

Представлены результаты расчетов химических сдвигов $K\alpha$ - и L -линий катионов металлов IV-й группы относительно нейтральных атомов и $K\alpha$ -линий внутриостовных переходов на свинце в PbO и PbF_2 по отношению к нейтральному атому свинца. Обсуждаются перспективы предлагаемого подхода для оценки и прогнозирования свойств матриц для иммобилизации высокоактивных отходов ядерного топливного цикла. Работа поддержана грантом РФФИ № 13-03-01307а.

1. Ю.В. Ломачук, А.В.Титов, Препринт ПИЯФ №**2890** (2012).
2. N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, A.V. Titov, *Int. Rev. At. Mol. Phys.* **1**, 63 (2010).
3. A.V.Titov, N.S.Mosyagin, A.N.Petrov, D.DeMille, *Progr.Theor.Chem.Phys.*, **B15**, 253 (2006).

Конструкция кванта вакуума

Дикусар В.В.¹, Тюняев А.А.¹

¹ Вычислительный центр имени Дородницына РАН, Москва, Россия

Модель «Периодическая система элементарных частиц» (ПСЭЧ) [1], сформированная в пространстве (mJe) (m – масса электрона, J – спин электрона, e – электрический заряд электрона), объясняет существование 27-ми элементарных частиц (ЭЧ). Помимо известных ЭЧ, ПСЭЧ предполагает в 0-м периоде наличие особой частицы – кванта вакуума «резона» [2]. В системе (mJe) резон имеет нулевые значения ($m = 0, J = 0, e = 0$).

В пространстве (mJe) ПСЭЧ обладает конденсированными свойствами, где квант вакуума является квазичастицей, отвечающей невозбуждённому состоянию и обладающей свойствами сверхтекучести и сверхпроводимости. «Тело» резона сформировано симметричной куперовской парой – электроном $e^-(1;1;-1)$ и позитроном $e^+(1;1;+1)$ [3], образующих одно двойное квантовое кольцо фермионной сверхтекучей жидкости. Сверхтекучая компонента u_s связана с ϕ соотношением $u_s = \text{grad}\phi \hbar/m$, где: $\text{grad}\phi$ – градиент функции $\phi = \phi(x, y, z)$. Возникшее движение пары e^-e^+ по кольцу квантуется. На осях квантовых вихрей потенциальность течения сверхтекучей жидкости может нарушаться: циркуляция скорости $\Gamma = \int u$ квантуется, квант – \hbar/m .

В условиях сверхпроводимости пара e^-e^+ разъединена диамагнетизмом Ландау. Происходит выдавливание магнитного поля (эффект Мейснера). На этом основано сочленение нескольких резонансов: через центр каждого кольца одного резона без трения проходят кольца ещё четырёх резонансов; каждый квант вакуума выдавливает магнитные поля четырёх других – система автоматически «центрируется». Выстраивается структура вакуума – объёмный метаматериал [4] с собственной электромагнитной упругостью и способностью проводить электромагнитные волны.

Радиус резона $r_p \sim 1,65 \times 10^{-12}$ м; длина волны $\lambda = 1,03 \times 10^{-11}$ м [6]. Разрыв резона (возбуждением) переводит квазичастицу «квант вакуума» в другую квазичастицу «нейтрон» [5] при сопутствии α -, β -, γ -излучений. Этот процесс реализуется в объектах, именуемых «белая» дыра. Обратный процесс, реализуемый в «чёрных» дырах, переводит нейтрон в квант вакуума.

1. Тюняев А.А., Периодическая система элементарных частиц. – М.: Спутник+, 2009.
2. Дикусар В.В., Тюняев А.А., Резон – квант пространства: свойства, особенности, качества // Динамика неоднородных систем. ИСА РАН. 2010. - № 50 (1). - С. 72 – 79.
3. Дикусар В.В., Тюняев А.А., О сверхпроводимости в квантах вакуума // Материалы 1-й Нац. конференции по сверхпроводимости. Москва: НИЦ им. Курчатова, 2011.
4. I.I. Smolyaninov. Vacuum as a hyperbolic metamaterial. arXiv:1108.2203v1. 10.08.2011.
В.В. Дикусар, А.А. Тюняев. Опыт создания модели нейтрона в пространстве констант mJe // Материалы семинара «Нейтроника». Обнинск: ФГУП «ГНЦ РФ ФЭИ», 25 октября 2011.

Свойства квантового фазового перехода в $\text{Ba}_3\text{Cr}_2\text{O}_8$

О.И. Утесов¹, А.В. Сыромятников¹

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

В последнее время большой интерес вызывают свойства так называемых квантовых спиновых жидкостей – веществ с конечной корреляционной длиной при нулевой температуре и щелью в спектре возбуждений. Такими свойствами обладают димерные системы, которые состоят из пар атомов – димеров - обладающих ненулевым магнитным моментом связанных сильным обменным взаимодействием и слабым междимерным взаимодействием между парами. Одним из веществ с такой структурой является кристалл $\text{Ba}_3\text{Cr}_2\text{O}_8$, где ионы Cr^{5+} обладают моментом $\frac{1}{2}$. При низких температурах свойства вещества описываются гамильтонианом Гайзенберга с анизотропными междимерными обменами из-за низкой $C2/c$ симметрии кристалла [1].

Методами диаграммной техники был найден спектр элементарных возбуждений исследуемого вещества. Во внешнем магнитном поле спектр элементарных возбуждений системы расщепляется на три ветви, при этом одна из ветвей при достижении магнитным полем критического значения становится безщелевой и образуется конденсат. Ранее авторами работы [2] была развита самосогласованная теория среднего поля, которая не может в полной мере описать свойства фазового перехода. В частности, определить какой из сценариев будет иметь место – будет один конденсат в одном из двух эквивалентных минимумов спектра или два одинаковых конденсата в каждом из них, что соответствует спонтанному нарушению разных симметрий.

Нами были вычислены константы взаимодействия для магнонов в одном и разных минимумах спектра в критическом магнитном поле в первом порядке теории возмущений. Исходя их полученных значений, был сделан вывод, что образуется один конденсат и имеет место спонтанное нарушение инверсионной симметрии. Используя выражения из книги [3] для бозе-газа малой плотности были получены выражения для зависимости критического поля от температуры, намагниченности от величины внешнего магнитного поля, проведено сравнение с экспериментальными данными.

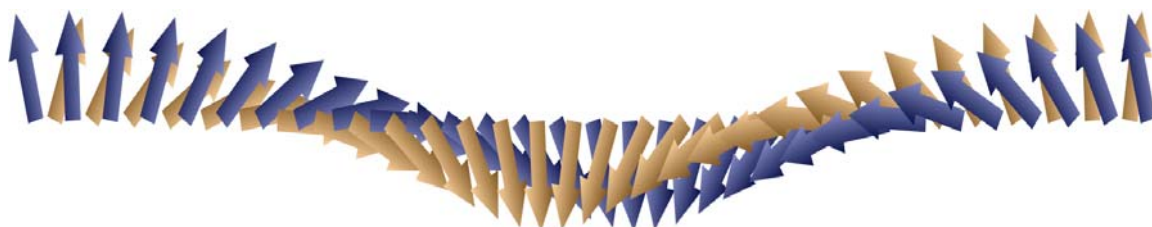
1. M. Kofu, J.-H. Kim, S.-H. Lee, H. Ueda, Y. Qiu, H.-J. Kang, M.A. Green and Y. Ueda, Phys. Rev. Lett. **102**, 037206 (2009).
2. T. Dodds, B.-J. Yang and Y. B. Kim, Phys. Rev. B **81**, 054412 (2010).
3. В.Н. Попов, Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике, М. , Атомиздат, 1976.

Закрутка и скосы в спиновой структуре MnSi при учёте взаимодействия нескольких магнитных сфер

В.А. Чижиков, В.Е. Дмитриенко

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

В [1,2] было предсказано, что наряду с закруткой взаимодействие Дзялошинского–Мории (ДМ) вызывает в хиральных магнетиках скосы между спиновыми подрешётками (рисунок). В [3] найдено, что отдельные связи вносят в закрутку вклад $\sim(\mathbf{D}\cdot\mathbf{b})$, где \mathbf{D} – вектор ДМ связи \mathbf{b} . Показано, что в \mathbf{b} вместо реальных координат магнитных атомов нужно подставлять «обменные» координаты, являющиеся комбинациями констант обменного взаимодействия J связей. В частности, для MnSi $x_{\text{exch}}=(J_1+3J_2-J_3)/8(J_1+J_2+J_3)$, где J_1, J_2, J_3 – обменные параметры связей трёх первых магнитных сфер. Из различных квантово-механических расчётов следует, что векторы ДМ должны лежать примерно перпендикулярно связям. В этом случае закрутка (шаг спирали и хиральность) определяется произведением $D_+(x_{\text{exch}}-x)$, где D_+ – комбинация компонент векторов ДМ, ответственная также и за скосы. Таким образом, закрутка и скосы оказываются взаимосвязаны. Также показано, что при учёте нескольких магнитных сфер связь феноменологической и микроскопических обменных констант является не столь тривиальной, как в приближении ближайших соседей. Аналогичное рассмотрение было проведено и для кубического ферримагнетика Cu_2OSeO_3 .



Закрутка и скосы в модельном одномерном кристалле с двумя подрешётками. Скосы приводят к возникновению двух спиралей с одинаковым волновым числом и постоянным фазовым сдвигом.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-02-00367) и Программ фундаментальных исследований Президиума РАН «Вещество при высоких плотностях энергии» и «Дифракция синхротронного излучения в мультиферроиках и хиральных магнетиках».

1. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko, Phys. Rev. B **85**, 014421 (2012).
2. V. E. Dmitrienko, V. A. Chizhikov, Phys. Rev. Lett. **108**, 187203 (2012).
3. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko “Multi-shell contribution to the Dzyaloshinskii-Moriya spiralling in MnSi-type crystals”, <http://arxiv.org/abs/1211.1517>

Фазовые переходы и диффузное рассеяние

А.Е. Шестаков¹, Ф.А. Кассан-Оглы², В.Е. Архипов², Ю.Э. Турхан²

¹РФЯЦ – Всероссийский НИИ Технической Физики, Снежинск, Россия

²Институт Физики Металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Тесная связь фазовых переходов и диффузного рассеяния была показана при исследовании пировскитов. Для объяснения картин диффузного рассеяния и её температурной эволюции была сформулирована теория кооперативных колебаний одно- и двумерных атомных объектов [1, 2].

В развитие этой идеи построена теория одиночных структурных фазовых превращений из ОЦК структуры в ГЦК, ГПУ, ДГПУ и каскадов фазовых переходов [3] при учете взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями. Показано, что фазовые превращения ОЦК—ГПУ и ОЦК—ГЦК происходят не в одной точке, а в температурном интервале. В случае ОЦК—ГПУ превращения сначала при понижении температуры ОЦК структура в некоторой точке скачком превращается в орторомбическую структуру, близкую к ГПУ структуре, а затем при дальнейшем понижении температуры эта структура плавно изменяется, превращаясь в строго плотноупакованную гексагональную структуру при $T \rightarrow 0$. В случае ОЦК—ГЦК происходит аналогичное превращение в строго плотноупакованную гранецентрированную кубическую структуру при $T \rightarrow 0$, но через моноклинную структуру. Несмотря на то, что в верхней точке фазового перехода симметрия понижается, а при $T=0$ симметрия повышается, подгрупповая связь присутствует в обеих точках, и концепция Ландау выполняется.

Рассчитана картина высокотемпературного диффузного рассеяния, а также совместная перестройка исходных Брэгговских рефлексов и эволюция диффузного рассеяния в Брэгговские рефлексы при переходах в низкотемпературные фазы [4].

Получены экспериментальные данные по диффузному рассеянию плотноупакованными (ГЦК, ГПУ) кристаллами.

1. Denoyer F., Comès R. and Lambert M. *Sol. State Comm.* 1970. V. 8. P. 1979—1981.
2. Denoyer F., Comès R. and Lambert M. *Acta Cryst.* 1971. V. A27. P. 414—420.
3. Кассан-Оглы Ф.А., Архипов В.Е., Шестаков А.Е., *ФММ.* 109, 608 (2010)
4. Kassan-Ogly F.A., Naish V.E. and Sagaradze I.V., *Phase Transitions*, 49, 89 (1994).

Секция «Нейтронная дифракция»

Структурные фазовые переходы в кристаллах твердого раствора Cu_4SeTe

Ю.И. Алыев^{1,2}, Г.Г. Гусейнов²

¹Бакинский институт повышения квалификации и переподготовки педагогических кадров, Баку, Азербайджан

²Институт физики НАН Азербайджана, Баку Азербайджан

Известно, что термомагнитные и термоэлектрические материалы с малой решеточной теплопроводностью и высокой подвижностью носителей заряда имеют широкую область применения. К числу таких материалов относятся суперионные халькогениды Ag, Cu и различные твердые растворы на их основе. В связи с изложенным в настоящей работе приводятся результаты исследования структурных фазовых превращений кристаллов состава Cu_4SeTe в широком температурном интервале (300–773 К). Все температурные эксперименты по выявлению структурно-фазовых переходов в кристалле Cu_4SeTe выполнены на порошковом дифрактометре "D8 ADVANCE" фирмы "Bruker", в вакууме (10^{-2} торр), режим: 40 кV, 40 мА, CuK_α - $\lambda=1.5406\text{Å}$, $10 < 2\theta < 80^\circ$.

Для определения кристаллографических параметров, были синтезированы и получена дифракционная картина образцов Cu_4SeTe при 300 К для. На основе полученных дифракционных данных (2Θ , d) определены кристаллографические параметры низкотемпературной фазы исследуемого объекта. Методом автоиндуцирования по программе "TOPAS" и уточнения данных по программе "EVA" было установлено, что низкотемпературная фаза Cu_4SeTe кристаллизуется в гексагональной структуре с периодами решетки $a=4,178\text{Å}$, $c=41,921\text{Å}$, ф.гр. R-3m, Z=12.

После определения основных кристаллографических параметров низкотемпературной фазы Cu_4SeTe приступили к высокотемпературному исследованию в том же образце и режиме. Их сравнение показало, что в области $273\text{K} < T < 573\text{K}$ наблюдается существенное изменение интенсивности дифракционных пиков за счет появления новых отражений и погасания ряда пиков. На основе расчета дифрактограммы выявлено, что вблизи температуры 573 К низкотемпературная фаза превращается в примитивную кубическую фазу с $a=10,923\text{Å}$, ф.гр. Pa-3. В дальнейшем при температуре до 673 К полученная дифракционная картина оказалась идентичной с дифрактограммой при 573 К. Дальнейшее повышение температуры ($T=723\text{K}$) показало, что вблизи этой температуры примитивно кубическая фаза перешла в ГЦК фазу с периодом решетки $a=5,950\text{Å}$, ф.гр. Fm3m, Z=4. В заключение отметим, что в результате приведенных исследований установлено, что гексагональная α фаза Cu_4SeTe вблизи 673 К переходит в примитивно кубическую (β), а около 773 К γ -ГЦК фазу. Процесс фазового превращения носит обратимый характер.

Влияния температуры и давления на структурные изменения в аморфных фуллеритах

П.А. Борисова, М.С.Блантер, В.П. Глазков, В.А.Соменков

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Ранее нами было показано [1,2], что в аморфных фуллеритах C_{60} и C_{70} при нагревании наблюдается полиаморфный переход из аморфной молекулярной фазы в аморфную атомарную графеноподобную фазу, устойчивую до высоких температур. В настоящей работе методами нейтронной и рентгеновской дифракции и дифференциальной сканирующей калориметрии исследованы превращения в аморфном фуллерите C_{60} при приложении высокого давления или при совместном воздействии температуры и давления. Аморфизация фуллерита проводилась методом механоактивации в высокоэнергетических шаровых мельницах, высокое давление (до 120 кбар) - в сапфировых и алмазных наковальнях. Совместное воздействие нагрева (1000-1400 °С) и давления (700 бар) осуществлялось в процессе электро-импульсного плазменного спекания.

Было показано, что просто приложение высокого давления не изменяет структуру аморфного фуллерита, однако спекание под давлением приводит к полиаморфному превращению в другую аморфную фазу, которую можно считать аморфным турбостратным графитом, отличным от описанной выше графеноподобной аморфной фазы. Аморфный турбостратный графит также устойчив до высоких температур. Такой же полиаморфный переход наблюдается при спекании и в композитах аморфный фуллерит – железо, при этом не обнаружено влияние на него железа.

Обе высокотемпературные аморфные фазы могут представлять практический интерес для использования в металл-углеродных нанокompозитах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 13-02-00208а, 12-02-12069-офи_м, 12-02-12070-офи_м) и госконтракт № 14.518.11.7016.

1. С.С.Агафонов, В.П.Глазков, И.Ф.Кокин, В.А.Соменков, ФТТ **1245**, 52(2010).
2. P. A. Borisova, S. S. Agafonov, V. P. Glazkov, N. P. D'yakonova, and V. A. Somenkov, Crystallography Reports **56**(2011).

Исследование возможностей методики спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов в изучении систем фрактальной природы

*Е.В. Величко¹, Ю.О. Четвериков¹, Л.А. Аксельрод¹, В.Н. Забенкин¹,
W.H. Kraan², Г.П.Копица¹, W.G. Bouwman², С.В. Григорьев^{1,3}*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

²Delft Technical University, Delft, Netherlands

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

В работе показана возможность применения методики спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (СЭМУРН) для изучения образцов фрактальной природы. В качестве исследуемых образцов были выбраны ксерогели аморфного диоксида циркония, являющиеся поверхностными фракталами ($D_s=2.6, 2.1$), активированный уголь, являющийся объемным фракталом ($D_v=2.9$) и порошок известняка, не проявляющий фрактальных свойств ($D_s=2.0$). Показатели фрактальной степени определены из данных малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения.

Измерения производились на установках СЭМУРН ПИЯФ и SESANS Дельфтского Технологического Университета. В ходе эксперимента исследовались зависимости амплитуды спин-эхо сигнала от так называемой спин-эхо длины δ , которая менялась в диапазоне от 30 нм до 20 мкм.

Из величины амплитуды спин-эхо сигнала при больших δ вычисляли полное сечение рассеяния. Затем во всем диапазоне δ рассчитывали корреляционную функцию СЭМУРН по формуле:

$$G(\delta) = 1 + \frac{\ln(P(\delta))}{l \cdot \sigma_t},$$

где $P(\delta)$ – амплитуда спин-эхо сигнала, l – толщина образца (см), σ_t – полное сечение рассеяния (см^{-1}).

В ходе работы была рассчитана модельная корреляционная функция СЭМУРН для образцов фрактальной природы. Из аппроксимации корреляционных функций для разных типов образцов определены: тип фрактальной структуры, при ее наличии, ее размерность и диапазон масштабов, в котором она существует. Полученные таким путем данные находятся в соответствии с данными, полученными методами МУРН и МУРР, из чего можно сделать вывод о применимости метода СЭМУРН для подобного рода исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-02-12066-офи_м, № 12-02-31242-мол_a).

Система контроля заполнения камеры криогенного замедлителя реактора ИБР-2

*А.А. Богдзель, А.А. Верхоглядов, В.В. Журавлёв, С.А. Куликов,
Ф.В. Левчановский, Е.И. Литвиненко, А.В. Петренко, А.П. Сиротин,
А.В. Чураков, Е.П. Шабалин*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Высокоэффективный криогенный замедлитель нейтронов для реактора ИБР-2 на основе ароматических углеводородов создан в Лаборатории Нейтронной Физики им. И.М. Франка и в настоящее время работает в штатном режиме. Рабочее вещество замедлителя - смесь мезитилена с т-ксилолом в виде твердых шариков диаметром 3-4мм, которые периодически сменяются в камере замедлителя. Одной из проблем загрузки шариков является равномерность заполнения ими камеры замедлителя. Наблюдение за процессом заполнения реализовано путём получения 2D изображений замедлителя на двухкоординатном ПЧД методом «камера-обскура».

Созданная система наблюдения позволяет также получать спектры нейтронов, контролировать отогрев и слив отработанного мезитилена. В настоящее время система наблюдения криогенного замедлителя, установленная на 8-м канале реактора ИБР-2, обнаруживает усиление потока нейтронов 6-10Å в 12 раз при использовании нового замедлителя, а также отсутствие заметной деградации спектра.

Neutron scattering by acoustic waves in solids

V. Gavrilov¹, E. Raitman¹, D. Mjasishev¹, M. Ruchkin²

¹ *Institute of Physical Energetics, Riga, Latvia*

² *“Terra”, Zelenograd, Moscow reg., Russia*

The neutron interactions with (AW) in solids observed by different methods is discussed.

Diffraction. High-frequency ultrasound induces transitions between the sheets of the dispersion surface of neutron in the perfect single crystals. These transitions lead to the strong increasing of the diffracted intensity I_h . In deformed crystals the drastic *decrease* (by up 50-70%) in I_h for *small* AW amplitude is observed. Some fine oscillations, different for perfect and deformed crystals, are observed by us using single (Riga) and double-crystal spectrometers (Dubna). However the direct observations of the neutron inelastic scattering on such facilities is impossible because the energy of the ultrasonic phonons is very small, e.g. $E_s = 413$ neV at $f_s = 100$ MHz AW frequency in Si.

Neutron Spin Echo. For the first time neutron inelastic scattering on bulk AW in single crystals (silicon, PG, mice and Kbr) and vitreous quartz was observed by using neutron spin echo spectrometer IN11 (ILL, Grenoble). Our approach opens up the way for the systematic investigation of ultrasonic excitations in different perfect and mosaic single crystals, polycrystals, glasses, amorphous materials, liquid crystals and so on. The important information concerning space distribution of amplitude and coherence of ultrasonic field was found by this technique.

Reflectometry. The regimes of total and Bragg reflection of polarized neutrons from a layered structure was investigated by us as a function of the amplitude and frequency of transverse and longitudinal AW excited in the nanostructures and glass mirrors for $\lambda_n = 0.2 - 1.0$ nm on spectrometers PNS-1 (Dubna) and for $\lambda_n = 0.466$ nm on V-6 (Berlin). The off-specular reflection of neutrons and the shifting of the nodes and antinodes of the neutron wave field are observed.

Организация частиц на границе раздела "неполярная ферожидкость - кремний" по данным нейтронной рефлектотрии

*И.В. Гапон^{1,2}, М.В.Авдеев¹, Л.А.Булавин², В.И. Петренко^{1,2},
А.В. Нагорный^{1,2}, L.Vecas³, А.А. Воробьев⁴, В.Л.Аксенов^{5,1}*

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³Romanian Academy-Timisoara Branch, Center for Fundamental and Advanced Technical Research, Timisoara, Romania

⁴Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

⁵НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

Рассмотрено особенности влияния факторов на изменение рефлектотрической кривой. Сделаны расчеты воздействия шероховатости на границе раздела двух сред и наличия оксида на подложке на рефлектотрическую кривую.

Получена экспериментальная зависимость коэффициента зеркального отражения тепловых нейтронов от модуля вектора рассеяния для системы «кремний – неполярная магнитная жидкость» для концентрации магнитной фазы 5% и 7%, с обработки которой был восстановлен профиль плотности длинны рассеяния.

Показано, что в шаре магнитной жидкости вблизи контакта с кремнием образовалось два слоя, первый состоит с поверхностно-активного вещества, второй – с магнитных частиц. При этом толщина слоев и плотность упаковки магнитных частиц зависят от концентрации магнетита в магнитной жидкостной системе.

Для системы «кремний - неполярная магнитная жидкость» обнаружено явления адсорбции магнитных частиц на кремнии.

High pressure effects on the crystal and magnetic structure of multiferroic $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$

N.T. Dang^{1,2}, D.P. Kozlenko¹, S.E. Kichanov¹, E.V. Lukin¹, B.N. Savenko¹,
A.I. Smirnov³, L.S. Dubrovinsky⁴

¹ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

² Tula State University, Tula, Russia

³ P.L. Kapitza Institute for Physical Problems RAS, Moscow, Russia

⁴ Bayerisches Geoinstitute, University Bayreuth, Bayreuth, Germany

The multiferroic materials, demonstrating a coupling between magnetic and electric subsystems, have become a subject of extensive scientific research in recent years. A coexistence of spontaneous ferroelectric polarization with long range magnetic order in multiferroics provides a route for a construction of novel electronic devices with a possibility to control of magnetic properties by electric field and vice versa. Recently a novel class of multiferroics, in which the symmetry arrangement of ordered magnetic moments breaks the inversion symmetry and allows ferroelectricity, was discovered. The $\text{MFe}(\text{MoO}_4)_2$ ($\text{M}=\text{Rb}, \text{K}$) compounds represent unique samples of such materials, exhibiting multiferroic phenomena in combination with geometrically frustrated magnetism on a triangular lattice.

In this research, the structural, magnetic and vibrational properties of $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ have been studied by means of X-ray and neutron powder diffraction, magnetic susceptibility measurements and Raman spectroscopy at high pressures up to 10 GPa. The gradual structural phase transition from the initial trigonal $P\bar{3}m1$ to the monoclinic $C2/c$ phase was observed at pressures above 1 GPa. The triangular antiferromagnetic order with a propagation vector $q = (1/3, 1/3, q_z)$ in the suppressed trigonal phase remains incommensurate and the q_z value increases from 0.45 to 0.48 in the pressure range 0 – 2 GPa at $T = 2$ K. The pressure coefficient of the Néel temperature is equal to $(1/T_N)dT_N/dP = 0.09 \text{ GPa}^{-1}$. No evidence of the formation of the long range magnetic order in the monoclinic phase was found. The pressure dependences of the stretching and bending modes of MoO_4 octahedra and translational lattice modes for the trigonal and monoclinic phases were obtained.

Исследование магнитной структуры мультиферроиков EuMn_2O_5 , $\text{Tb}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Mn}_2\text{O}_5$ ($x=0, 0.2$) методом XYZ-поляризационного анализа нейтронов

Е.К. Димакова^{1,2}, И.А. Зобкало¹, В.А. Поляков¹, С.В. Гаврилов¹

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

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

Магнитное упорядочение в EuMn_2O_5 появляется при температуре ниже $T_N \approx 40$ К и описывается несоразмерным волновым вектором $k = [k_x \ 0 \ k_z]$, где $k_x \approx 0.5$, $k_z \approx 0.3 \div 0.33$ [1], что характерно для соединений RMn_2O_5 . Наши результаты, полученные методом нейтронного XYZ-поляризационный анализа, свидетельствуют о том, что в EuMn_2O_5 реализуется магнитная структура типа простой спирали. При температуре 4 К усредненная плоскость вращения магнитных моментов составляет угол $\sim 40^\circ$ с плоскостью ab . С увеличением температуры этот угол увеличивается и при 25 К составляет около 70° .

Наши нейтронные исследования показали, что в $\text{Tb}_{0.8}\text{Ce}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$ температурная эволюция магнитных фаз происходит следующим образом: ниже $T_N \approx 39$ К магнитная структура описывается соразмерным волновым вектором $k_1 = [0.5 \ 0 \ k_{z1}]$, $k_{z1} = 0.25$, который не меняется при охлаждении до 15К, при дальнейшем понижении температуры k_{z1} плавно меняется до 0.28. Когда температура достигает 20 К (при охлаждении!), появляется вторая магнитная фаза с несоразмерным волновым вектором $k_2 = [0.5 \ 0 \ k_{z2}]$. Значение k_{z2} при температурах 20К – 15К меняется от 0.26 до 0.292, после чего остается постоянным вплоть до 1,5 К. Таким образом, в широкой области температур две магнитные фазы сосуществуют.

В $\text{Tb}_{0.8}\text{Ce}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$ наблюдается существенный температурный гистерезис. При нагреве величины компонент k_{z1} , k_{z2} изменялись к своим «высокотемпературным» значениям при температурах значительно более высоких, чем это происходило при охлаждении. Разница составляет примерно 7 К. Эта ситуация отличается от эволюции магнитных фаз в чистом TbMn_2O_5 , где наблюдается три магнитных фазы (см., например, [2]), и они сосуществуют в очень узкой области температур. Наши исследования показывают, что TbMn_2O_5 область температур сосуществования также зависит в некоторой степени от «температурной предыстории».

1. V. Polyakov, V. Plakhty, M. Bonnet, P. Burllet, L.-P. Regnault, S. Gavrilov, I. Zobkalo, O. Smirnov, 2001 Physica B 297 208

2. P.G. Radaelli, L.C. Chapon, 2008 J. Phys.: Condens. Matter 20 434213

Приложение метода МД моделирования к анализу данных МУРН разбавленными органическими растворами жирных кислот

Р.А. Еремин¹, Х.Т. Холмуродов^{1,2}, В.И. Петренко^{1,3}, М.В. Авдеев¹, Л. Рошта⁴

¹*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

²*Международный университет «Дубна», Дубна, Россия*

³*Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина*

⁴*Wigner Research Centre for Physics, Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary*

Целью работы было исследование возможности применения метода классической молекулярной динамики (МД) при анализе данных МУРН. По методу МД была определена локальная структура растворителя (декалина) вблизи молекул насыщенных монокарбоновых (миристиновой, C14, и стеариновой, C18) кислот и построены модели распределений ПДР в растворе.

Монокарбоновые кислоты, которые используются для стабилизации магнитных наночастиц феррожидкостей (магнитных жидкостей) имеют длину порядка 2 нм и сильно анизотропны. Широко используемый органический неполярный растворитель, декалин (C₁₀H₁₈), имеет сравнимый размер молекулы порядка 1 нм. Изучение влияния организации растворителя вокруг молекул кислот, может быть полезным для дальнейших структурных исследований магнитных жидкостей, а также предоставить дополнительную информацию для детального описания и полного понимания процесса приготовления феррожидкостей на микроскопическом уровне.

Эксперименты по МУРН растворами указанных кислот в декалине были проведены на стационарном исследовательском реакторе Будапештского нейтронного центра (Венгрия). С целью снижения уровня некогерентного фона был использован дейтерированный растворитель. Расчеты по МД моделированию проводились на параллельном кластере центрального информационно-вычислительного комплекса ЛИТ ОИЯИ.

В ходе работы были рассмотрены различные модели для расчета кривых МУРН. В рамках первой из них не учитывался вклад в рассеяние модуляции ПДР растворителя. Учет локальной структуры растворителя в направлении перпендикулярном молекулам кислот вплоть до 10 Å для каждой из кислот, наблюдаемой по результатам МД, был выполнен во второй модели, но не привел к качественному описанию кривых. В рамках третьей модели дополнительный учет изменения ПДР растворителя в направлении оси молекулы (в указанных масштабах) позволил достичь приемлемого уровня совпадения расчетных и экспериментальных данных (параметров Гинье, интенсивностей рассеяния в нулевой угол и других). Таким образом, подход МД моделирования может эффективно использоваться для описания МУРН с позиций микроскопической структуры образцов.

Механизм термомагнитного эффекта в сплаве $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$

А.В. Ковалёв

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Термин «термомагнитный эффект» предлагается использовать при изучении механизмов получения постоянных магнитов. Работа в этом направлении нами была начата после обнаружения следующих фактов. Анизотропная пленка сплава $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ толщиной 3 нм, изготовленная методом магнетронного распыления, отжигалась при 150°C (без приложения внешнего магнитного поля), что привело к росту ее остаточного магнитного момента в 2.5 раза и сильным изменениям кристаллической текстуры моноклинной магнитной фазы [1, 2]. Остальные результаты получены методами рассеяния нейтронов (реактор ВВР-М, Гатчина).

На установке векторного анализа поляризованных нейтронов были обнаружены разные типы магнитных текстур пленок, поведение которых после приложения магнитных полей и отжига образцов позволили говорить о возможности решения более сложных задач [3].

Изменения намагниченностей пленок при разных режимах термической обработки изучались на установке малоуглового рассеяния „Вектор“. При этом наблюдались однозначные корреляции вычисленных намагниченностей с интенсивностями рассеянных нейтронов [4, 5]. Однако поведение измеряемых величин в процессе отжига пленок удалось объяснить лишь после сравнения результатов малоуглового рассеяния и нейтронной дифракции, полученных на пластинках ($d = 1.2 \text{ mm}$) сплавов $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ и $\text{Co}_{68}\text{Fe}_{32}$ [6]. Существенных отличий результатов термической обработки пленок и массивных образцов не обнаружено.

Для изучения механизма термомагнитного эффекта, процессов перемагничивания и релаксации магнитных текстур в анизотропных пленках использовалась и рефлектометрия поляризованных нейтронов [7].

Выполненные нами исследования позволяют предложить общую схему термомагнитного эффекта.

1. A. V. Kovalev. Proc. of Moscow Intern. Symp. on Magnet. MSU. P. 2. M., 1999. P.83.
2. А. В. Ковалев, Г.Е. Шмелев. Поверхность 4, 33 (2001).
3. А. В. Ковалев. Поверхность 8, 106 (2002).
4. А. В. Ковалев. Перспективные материалы 4, 86 (2004).
5. А. В. Ковалев. Поверхность 10, 51 (2004).
6. А. В. Ковалев, О. П. Смирнов. ФТТ. Т. 55, в. 1, 81 (2013).
7. А. В. Ковалев. Конденсир. среды и межфазные границы. Т. 14, №3, 310 (2012).

Развитие методов комплексной радиационной диагностики гео- и палеоматериалов

Е.С. Коваленко, А.А. Калоян, К.М. Подурец, В.А. Соменков

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В работе продемонстрированы возможности комплексного подхода к изучению внутреннего строения, структуры, состава (элементного и фазового) объектов геологического и палеонтологического происхождения. Применялся комплекс нетрадиционных интроскопических нейтронно-синхротронных методик, включающих методики рефракционного и дифракционного контраста. Указанные методы позволяют различать компоненты объектов, близкие по плотности, наблюдать поверхности раздела, области повышенной концентрации неоднородностей, визуализировать отдельные монокристаллические блоки.

На исследовательском реакторе ИР-8 и в Курчатовском центре синхротронного излучения были выполнены эксперименты по нейтронной и синхротронной томографии различных ископаемых беспозвоночных (иглокожих, брахиопод и т.п.); для тех же объектов проведены дифракционные исследования и установлено наличие моно- и поликристаллических фаз кальцита; методом РФА определен элементный состав. Показано, что нейтронная томография позволяет различать минералы и породы, неразличимые для рентгеновского излучения. На примерах некоторых палеонтологических объектов продемонстрированы преимущества томографии с использованием синхротронного излучения и тепловых нейтронов. Полученные результаты показывают, что применение комплексного подхода к исследованиям геологических и палеонтологических объектов методами томографии, дифракции и другими на синхротронном излучении и тепловых нейтронах весьма перспективно.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования "Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий" в рамках государственного контракта №16.552.11.7055 и гранта РФФИ 12-02-12069-офи_м.

Моделирование суперпозиционного 48-детекторного 4-х секционного порошкового дифрактометра 9-го пучка реактора ВВР-М с помощью программного пакета McStas

М.П. Коляда¹

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

Моделирование методом Монте-Карло играет важную роль в процессе дизайна, расчета и оптимизации инструментов нейтронного рассеяния. Адекватная, отгестированная и грамотно разработанная математическая модель нейтронного инструмента открывает большие возможности для разработки новых и модернизации существующих инструментов. Хотя аналитические методы моделирования по-прежнему актуальны, только моделирование методом Монте-Карло позволяет работать с инструментами сложной геометрии и использующими поля сложной конфигурации. В настоящее время, специальные программные пакеты моделирования нейтронных инструментов – McStas, VITESS и другие – используются при разработке и оптимизации практически всех строящихся и модернизируемых нейтронных инструментов.

Целью работы было построение наиболее точной модели суперпозиционного 48-детекторного 4-х секционного порошкового нейтронного дифрактометра, созданного в ПИЯФ РАН и установленного на 9-ом канале реактора ВВР-М. На данном этапе модель находится на стадии оптимизации и доработки. Были смоделированы практически все элементы установки, в том числе системы изогнутых нейтроноводов, получены распределения интенсивности нейтронного пучка на этих элементах.

Данная модель может быть использована как для оптимизации параметров установки, так и для обучающих целей. Также построение данной модели является начальной стадией для более глобальной задачи, моделирования нейтронных установок и нейтроноводных сетей для строящегося реактора ПИК.

Исследование магнитной структуры NdMn_2O_5 методом нейтронной дифракции

И.А. Зобкало¹, С.В. Гаврилов¹, А.А. Кунцевич^{1,2}, С.Н. Барило³, С.В. Ширяев³.

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

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

Методом рассеяния нейтронов проведены исследования магнитного упорядочения в монокристалле NdMn_2O_5 . При температуре $T_N \approx 30$ К наблюдается переход в магнито-упорядоченное состояние с вектором $k = (0 \ 0 \sim 0.36)$. Ниже 30 К наблюдаются две магнитные фазы с близкими по величине векторами магнитной структуры $k_1 = (0.5 \ 0 \ k_{z1})$, $k_2 = (0.5 \ 0 \ k_{z2})$. Компоненты k_{z1} , k_{z2} монотонно увеличиваются при уменьшении температуры вплоть до ~ 25 К, затем остаются постоянными, принимая значения $k_{z1} = 0.384(2)$, $k_{z2} = 0.395(2)$. Наличие особенности в температурных зависимостях интегральных интенсивностей магнитного рассеяния в районе 18 – 20 К свидетельствует об еще одном магнитном переходе. Подтверждено влияние размера редкоземельного иона на физические свойства манганитов RMn_2O_5 , в том числе на формирование магнитного упорядочения в них. Это приводит к наблюдаемому нами отличию в температуре и типе магнитного упорядочения в NdMn_2O_5 от RMn_2O_5 с меньшими R^{3+} .

Статья - Препринт ПИЯФ № 2915 (2012).

**“VITESS polarized neutron suite” -
you can simulate any polarized neutron instrument!**

С. Маношин¹, А. Белушкин¹, А. Иоффе²

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Jülich Centre for Neutron Science at FRM II, Garching, Germany*

Монте-Карловское моделирование играет очень важную роль в процессе конструирования и оптимизации нейтронных инструментов. Это стимулировало разработку и развитие мощных программ моделирования нейтронных инструментов, среди которых наиболее известны VITESS, MCSTAS и RESTRAX.

В тоже самое время эти программы не позволяли моделирование инструментов, использующих прецессию поляризованных нейтронов. Теперь этот пробел полностью восполнен в последней версии VITESS, который является единственной программным комплексом позволяющим симулирование устройств использующих не только стационарные, но и зависящие от времени (как по величине, так и по направлению) магнитные поля. Это открыло уникальные возможности для моделирования практически любых нейтронных инструментов работающих с поляризованными нейтронами.

В частности, мы успешно просимулировали спиновую динамику в радиочастотном и градиентном адиабатическом радиочастотном флипперах и в резонаторе Драбкина. Используя эти компоненты, было успешно проведено моделирование практически всех видов нейтронных спин-эхо спектрометров: классическое нейтронное спин-эхо, нейтронное резонансное спин-эхо (NRSE), спин-эхо спектрометры с вращающимися и градиентными во времени магнитными полями, дифрактометров типа SESANS, а также MIEZE спектрометров.

Исследование окисления нанослоев титана методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии и атомно-силовой микроскопии

В.А. Матвеев, Н.К. Плешанов, В.Ю. Байрамуков, А.П. Булкин

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Исследование кинетики окисления нанослоев металлов имеет большое значение в связи с расширением области применений слоистых наноструктур. Изучение стабильности нанослоев Ti также связано с решением задачи улучшения эффективности поляризирующих нейтронных покрытий. Проведено исследование окисления полученных магнетронным напылением слоев Ti толщиной от 5 до 100 нм при температурах от 20 до 300°C методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии. Поверхность пленок титана до и после отжига исследовалась с помощью атомно-силовой микроскопии.

Характерное насыщение роста толщины окисного слоя с увеличением времени отжига при фиксированной температуре, логарифмическая зависимость от $1/kT$ при заданном времени отжига (Рис. 1) указывают на применимость известной модели Кабрера-Мотта [1] для окисления металлов. В этой модели предполагается, что электроны туннельно переходят от металла через слой окиси (диэлектрика) к кислороду на поверхности и ионизуют его, приводя к образованию однородного электрического поля. Поле уменьшает энергию термической активации перескоков ионов Ti и их выхода на поверхность с последующим окислением. Окисление нанотонких слоев титана имеет свои особенности, которые частично изучались ранее [2] и представляют интерес для дальнейшего исследования.

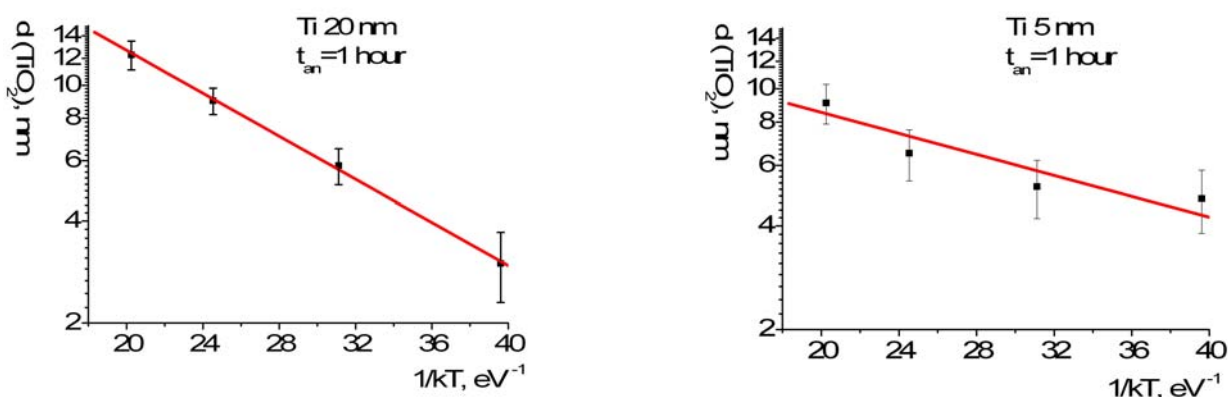


Рис. 1. Зависимости толщин окисного слоя от обратной температуры $1/kT$ для пленок Ti (20 и 5 нм), отожженных в течение 1 ч.

1. N. Cabrera, N. F. Mott. *Rep. Prog. Phys.*, 163, 12 (1949).
2. V.A. Matveev, N.K. Pleshonov, A.P. Bulkin, V.G. Syromyatnikov, *J. of Physics: Conf. Ser.* 340, 012086 (2012).

Работа выполнена с использованием оборудования регионального ЦКП "Материаловедение и диагностика в передовых технологиях" при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 12-02-31625 мол_a

Нейтронное исследование фазовых переходов в шпинели CuFe_2O_4

М.С. Мащенко^{1,2}, А.М. Балагуров¹, И.А. Бобриков¹

¹ Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия

² Самарский Государственный Университет, Самара, Россия

В последнее время резко возрос интерес к соединениям (они получили название мультиферроиков), в которых наблюдается одновременное существование электрического и магнитного упорядочения. Перспективными материалами для поиска таких свойств являются сильномагнитные ионные кристаллы со структурой шпинели, граната, перовскита.

Высокий интерес в этом классе соединений сохраняется к ферримагнитной шпинели CuFe_2O_4 . Наличие в ее составе ян-теллеровских (ЯТ) ионов Cu^{2+} обуславливает ее некоторые интересные свойства, в том числе наличие структурного фазового перехода из тетрагональной фазы в кубическую при нагревании.

В данной работе некоторые особенности структурного фазового перехода в шпинели CuFe_2O_4 изучены с помощью дифракции нейтронов. Эксперименты проведены на фурье-дифрактометре высокого разрешения, действующем в ЛНФ ОИЯИ на импульсном реакторе ИБР-2. Дифракционные спектры измерены в широком диапазоне температур (20 – 500⁰С) и обработаны с помощью метода Ритвельда.

Использование этого экспериментального метода позволило с хорошей точностью определить, что в феррите меди CuFe_2O_4 при $T \approx 440^\circ\text{C}$ происходит структурный переход с понижением симметрии высокотемпературной кубической фазы (пр. гр. $Fd\bar{3}m$) до тетрагональной (пр. гр. $I41/amd$) и возникновением ферримагнитной структуры. Установлено, что температура появления дальнего магнитного порядка выше температуры образования тетрагональной фазы. При охлаждении CuFe_2O_4 от 500⁰С в довольно широком температурном интервале ($\sim 40^\circ\text{C}$) наблюдается сосуществование обеих структурных фаз, которое имеет равновесный характер. Исследованный состав является полностью инвертированной шпинелью в кубической фазе, а в тетрагональной фазе параметр инверсии не превышает нескольких процентов ($x = 0.06 \pm 0.04$). В то же время, возникающая при охлаждении фаза, имеет классическую величину тетрагонального искажения ($\gamma \approx 1.06$). Характер температурных изменений параметров структуры при переходе из кубической в тетрагональную фазу позволяет говорить о том, что в его основе лежит ян-теллеровское искажение $(\text{Cu,Fe})\text{O}_6$ октаэдров, но не взаимная миграция атомов меди и железа.

Структура магнитной жидкости на основе декалина с избытком монокарбоновых кислот по данным малоуглового рассеяния нейтронов

А.В. Нагорный^{1,2}, *В.И. Петренко*^{1,2}, *Л.А. Булавин*², *L. Almasy*^{3,4}, *М.В. Авдеев*¹,
*L. Rosta*⁴, *В.Л. Аксенов*^{5,1}

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Paul Scherrer Institut, Villigen, Switzerland

⁴ Wigner Research Centre for Physics HAS, Budapest, Hungary

⁵ НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, Россия

Магнитные жидкости (МЖ), или феррожидкости, представляют собой коллоидные растворы магнитных наночастиц, которые покрываются поверхностно-активными веществами (ПАВ) для предотвращения их агрегации. Стабильность коллоидной системы преимущественно определяется взаимодействием ПАВ с растворителем. Одним из важных факторов, влияющих на устойчивость МЖ, является концентрация молекул ПАВ в растворе. На практике наблюдается оптимальное значение количества ПАВ в МЖ, которое отвечает наилучшей устойчивости системы. Настоящая работа выполнена в рамках систематического изучения влияния избытка ПАВ на структуру МЖ различных классов [1-5].

С помощью малоуглового рассеяния нейтронов определены структурные параметры классической магнитной жидкости на основе при различном избытке олеиновой, миристиновой и пальмитиновой кислот в объеме МЖ (до 20 об. %). На основе дополнительного сравнения поведения ОК в МЖ и в чистом растворителе сделан вывод об изменении взаимодействия между молекулами свободного (неадсорбированного) ПАВ в присутствии магнитных наночастиц. Тем не менее, МЖ остается устойчивой в отношении образования больших агрегатов как магнитных наночастиц, так и ПАВ в исследуемом диапазоне концентрации ПАВ.

1. В.И.Петренко, М.В.Авдеев, В.Л.Аксенов, Л.А.Булавин, Л.Рошта. *Поверхность. Рентг. Синхр. Нейтр. Исслед.* 2 (2009) 92–96.
2. V.I.Petrenko, M.V.Avdeev, L.Almasy, L.A.Bulavin, V.L.Aksenov, L.Rosta, V.M.Garamus. *Coll. Surf. A* 337 (2009) 91–95.
3. V.I.Petrenko, M.V.Avdeev, V.L.Aksenov, L.A.Bulavin, L.Rosta. *Solid State Phenom.* 152-153 (2009) 198–201.
4. М.В.Авдеев, И.А.Боднарчук, В.И.Петренко, Х.Т.Холмуродов, С.П.Ярадайкин. *ЖФХ* 83(7) (2009) 1275–1280.
5. V.I.Petrenko, M.V.Avdeev, V.M.Garamus, L.A.Bulavin, V.L.Aksenov, L.Rosta. *Coll. Surf. A* 369 (2010) 160–164.

Исследование внутренних напряжений методом дифракции нейтронов на установке ФСД реактора ИБР-2

И.В. Папушкин, Г.Д. Бокучава, В.В. Сумин, А.М. Балагуров

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Изучение остаточных напряжений в материалах при помощи дифракции нейтронов приобрело широкое распространение в мире из-за высокой проникающей способности нейтронов. Поэтому для проведения работ по исследованию остаточных напряжений на канале № 11а реактора ИБР-2 в ЛНФ имени И.М. Франка ОИЯИ (Дубна, Россия) создан нейтронный фурье-дифрактометр ФСД, который благодаря специальной корреляционной методике (использование быстрого фурье-прерывателя для модуляции интенсивности первичного нейтронного пучка и применение RTOF метода для накопления данных) позволяет получать дифракционные спектры высокого разрешения $\Delta d/d=2\div 4\times 10^{-3}$. Данный дифрактометр создавался с учетом мирового опыта в исследовании остаточных напряжений в материалах, также использовался опыт создания подобного типа приборов в России и за рубежом. На текущий момент установка активно используется в научной и технической сфере, где необходимо использование неразрушающих методов для решения материаловедческих задач.

Гексагональная спиновая структура А-фазы в MnSi: плотная упаковка скирмионных квазичастиц или двумерная сверхструктура

С.В. Григорьев^{1,2}, Н.М. Попова¹, Е.В. Москвин^{1,2}, В.А. Дядькин¹,
Ch. Dewhurst³, С.В. Малеев¹

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³ Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция

Методом малоуглового рассеяния нейтронов детально изучена магнитная структура кубического спирального магнетика MnSi в небольшой области (Н-Т)-фазовой диаграммы (А-фазе). Магнитная структура А-фазы характеризуется в пространстве импульсов двумерной гексагональной картиной из 6 брэгговских пиков с $\mathbf{k}_{h(1,2,3)}$, перпендикулярными приложенному магнитному полю \mathbf{H} [1]. В современной литературе эта структура получила название скирмионной решетки [1-3]. Авторы работ [1-3] предлагают для описания этой структуры концепцию плотной упаковки скирмионных квазичастиц, подобным вихрям магнитного поля в сверхпроводниках второго рода.

В нашей работе мы приводим аргументы в пользу того, что наблюдаемая структура является двумерной гексагональной спиновой сверхрешеткой, образующейся из-за конкуренции двух взаимодействий (ферромагнитного обмена и взаимодействия Дзялошинского–Мория), подобно одномерным модуляциям спиновой структуры (плоская спираль, коническая спираль). Во-первых, установлено, что волновой вектор двумерной гексагональной структуры \mathbf{k}_h с точностью до 2 % равен волновому вектору конической фазы \mathbf{k}_c . Во-вторых, направление волновых векторов $\mathbf{k}_{h(1,2,3)}$ остаются неизменными во всем кристалле размером 100 мм³, но лишь в области А-фазы, небольшой области (Н-Т) фазовой диаграммы ниже $T_C = 29$ К. За пределами А-фазы обнаружены капли разориентированной, предположительно гексагональной, спиновой структуры с \mathbf{k}_h перпендикулярным полю \mathbf{H} в диапазоне полей от $B_{T1} = 0.1$ Тл до $B_{T2} = 0.25$ Тл, и вплоть до низких температур $T = 25$ К. При этом не обнаружено никакого распада этих капель на индивидуальные, случайно разбросанные в пространстве скирмионы. На основе анализа полученных данных, мы заключили, что наблюдаемая структура не является плотноупакованной скирмионной решеткой, а оказывается примером сложной (двумерной) модуляции спинов в магнетиках.

Работа выполнена в рамках государственных контрактов No.02.740.11.0874 и 07.514.12.4003.

1. S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Boni, Science 323, 915 (2009).
2. U. K. Rossler, A. N. Bogdanov, and C. Pfleiderer, Nature 442, 797 (2006).
3. U.R. Rossler, A.A. Leonov, A.N. Bogdanov, Journal of Physics: Conference Series **303** (2011) 012105.

Трансформации спиновой структуры MnSi в области критических температур в магнитном поле

С.В. Григорьев^{1,2}, Н.М. Попова¹, Е.В. Москвин^{1,2}, В.А. Дядькин¹,
Ch. Dewhurst³, С.В. Малеев¹

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³ Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция

С помощью малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов изучены температурные трансформации спиновой структуры MnSi в критическом диапазоне температур вблизи $T_C = 29$ К в магнитном поле $H \sim H_A \sim 0,17$ Тл. С приложением поля вблизи T_C наблюдаются 3 различных магнитных состояния системы: (i) флуктуации спиновой спирали, беспорядочно ориентированные с волновым вектором \mathbf{k}_F ; (ii) одномерная коническая спираль с $\mathbf{k}_C \parallel \mathbf{H}$ и (iii) двумерная гексагональная спиновая сверхструктура с $\mathbf{k}_H \perp \mathbf{H}$.

Известно, что в нулевом поле в MnSi наблюдается сложный переход из парамагнитной фазы в геликоидальную фазу. При этом можно выделить три переходные области. Из парамагнитного состояния система переходит во флуктуирующее, частично-киральное состояние при $T^* \approx 31,5$ К, при этом функция рассеяния на данных флуктуациях описывается функцией Лоренца с шириной κ_F равной $2\mathbf{k}_F$. Затем, система, из частично-кирального состояния, переходит флуктуирующее 100% киральное при $T_k \approx 30$ К, при этом $\kappa_F \sim \mathbf{k}_F$. И, наконец, из 100% кирального состояния в упорядоченную спиральную структуру при $T_C = 29$ К [1].

При охлаждении в поле $H = 0,17$ Тл при $T = T^*$ появляются флуктуации конической спирали, которые добавляются к критическим флуктуациям плоской спирали (при этом $\mathbf{k}_C \neq \mathbf{k}_F$). При дальнейшем охлаждении к уже флуктуирующим объектам при $T = T_k$ добавляются флуктуации двумерной гексагональной структуры (флуктуации А-фазы). При $T = T_C$ появляются и сосуществуют коническая фаза и двумерная гексагональная фаза (А-фаза) на фоне присутствующих в системе критических флуктуаций обычной спирали. Следует отметить, что ширина пика конической фазы и гексагональная сверхструктура ограничена разрешением установки. А-фаза развивается при дальнейшем охлаждении ниже T_C , и доминирует над конической фазой. При дальнейшем охлаждении (ниже $T = 28$ К) наблюдается только коническая фаза. В области А-фазы гексагональная сверхструктура заметно доминирует над конической фазой, а их волновые вектора практически равны ($\mathbf{k}_H = (0.987 \pm 0.003)\mathbf{k}_C$).

Таким образом, экспериментально показано, что

- А-фаза является двумерной гексагональной спиновой сверхструктурой созданной теми же взаимодействиями (ферромагнитным обменом и DM взаимодействием) как и простая спиновая или коническая спираль, поскольку $\mathbf{k}_H = \mathbf{k}_C$ во всём диапазоне температур, а $\kappa_H = \kappa_C$ ограничены разрешением установки;

- критические флуктуации не коррелируют с гексагональной сверхструктурой (А-фазой), поскольку $\mathbf{k}_H \neq \mathbf{k}_F$ и $\kappa_H \neq \kappa_F$;

- коническая спираль оказывается энергетически выгоднее гексагональной сверхструктуры в области критических температур выше T_C , и проигрывает этой сверхструктуре только в области А-фазы ниже T_C .

Работа выполнена в рамках государственных контрактов No.02.740.11.0874 и 07.514.12.4003.

1. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, E. V. Moskvina, V. A. Dyadkin, P. Fouquet and H. Eckerlebe, Phys. Rev. B **81** (2010) 144413

Neutron Spherical Waves Propagation through a Vibrating Thick Ge Single Crystal

*E. Raitman¹, V. Gavrilov¹, D. Mjasishev¹, A. Hoser², O. Seidel², J. Stanh³,
M. Ruchkin⁴*

¹ *Institute of Physical Energetics, Riga, Latvia*

² *Helmholtz-Zentrum, BENSC, Berlin, Germany*

³ *Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland*

⁴ *"Terra", Zelenograd, Russia*

The results of experimental and theoretical studying into the influence of ultrasound on the neutron wave propagation in a thick Ge crystal are presented. The neutron intensity profiles were measured for the case of Laue diffraction inside a Borrmann fan. At low amplitudes of ultrasonic waves, the interference effects - diffraction intensity beatings - were observed. The observations were enabled due the uniform acoustic field distribution through the whole bulk of the crystal. As distinguished from the classical Shull's experiments, wide analyzing slits or PSD were used. To explain the results obtained, a modified theory for spatial distribution of the neutron diffraction intensities in the presence of acoustic excitation of the crystal is proposed. A good agreement between experiment and theory is obtained. At high amplitudes of ultrasonic waves the transition to the kinematic scattering was not observed, despite the large strains of crystalline lattice created by ultrasound. This could be connected with formation of super lattice having a standing wave period. A strong rise in the diffraction intensity and a sharp constriction of the neutron beam at the center of a Borrmann fan were observed. This new effect could be used for creation of ultrasound-controlled monochromators.

Работа поддержана грантами: РФФИ № 12-02-00794-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Нейтронное спин-эхо с использованием вращающихся магнитных полей

А.Б. Рубцов¹, А. Йоффе², В.И. Боднарчук¹, С.А. Маношин¹

¹ *Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия*

² *Jülich Center for Neutron Science, Garching, Germany*

Метод получения спин-эхо эффекта, основанный на использовании вращающихся магнитных полей (ВМП) был изложен в работе [1]. Ключевым элементом спин-эхо установки, в которой спин-эхо эффект получается таким методом, является устройство создающее ВМП. Один из способов получения магнитного поля требуемой конфигурации был реализован в работе [2], однако результаты эксперимента показывают, что диапазон рабочих частот ВМП в этом случае ограничен (~10 кГц).

В данной работе исследовалось одно плечо спин-эхо установки, представленное двумя элементами с ВМП. Симуляция эксперимента проводилась в программе VITESS. До недавнего времени в ней магнитные поля задавались ограниченным числом параметров, что снижало точность результатов симуляций. Нами был разработан новый модуль программы, позволяющий загружать распределение магнитного поля из внешнего источника (измеренное или смоделированное поле), что позволило учитывать краевые эффекты и рассеянные поля. Магнитное поле было смоделировано в программе MagNet. Совместное использование двух программных пакетов позволило значительно улучшить точность симуляций.

В результате нами были выявлены основные факторы, вызывающие деполяризацию пучка: рассеянные поля, соотношение толщины обмотки к характерному размеру поля вдоль направления распространения нейтронов, эллиптичность поля, а так же оценены перспективы применения данного метода.

1. A. Ioffe *Physica B*, 335 (2003), p. 169
2. Bodnarchuk V.I., Kraan W.H., Rekveldt M.T., Ioffe A., Neutron spin turners with a rotating magnetic field: first experiments. *Meas. Sci. Technol*, 2008, v.19, p 03401.

Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру сложного кобальтита $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5.5}$

А.В. Руткаускас¹, Д.П. Козленко¹, Z. Jirak², С.Е. Кичанов¹, Е.В. Лукин¹,
Б.Н. Савенко¹

¹Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Institute of Physics, Prague, Czech Republic

Сложные оксиды кобальта проявляют множество различных физических свойств: гигантское магнитосопротивление, переходы диэлектрик – металл, орбитальное и зарядовое упорядочение и т. д. Эти физические свойства могут найти широкое технологическое применение в качестве материалов для альтернативных источников энергии, катализаторов, электродов в топливных элементах, мембранах для сепарации кислорода, запоминающих устройств и т.д.

Кристаллическая и магнитная структура перовскитоподобного кобальтита $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ была изучена методом нейтронной дифракции при давлениях до 5.6 ГПа в температурном диапазоне 10 – 300 К.

Данное соединение при нормальных условиях имеет орторомбическую структуру, пространственную группу $R\bar{m}m$ и характеризуется сосуществованием двух антиферромагнитных фаз 2с и G типов. Исследовано влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5.5}$. Установлено, что во всем исследуемом диапазоне давлений и температур сохраняется исходная орторомбическая структура с пространственной группой $R\bar{m}m$. Так же обнаружено подавление магнитных фаз при высоком давлении и уменьшение температур Нееля 2с-фазы и фазы с G-типом магнитного упорядочения. Это может быть связано со спиновым переходом ионов кобальта из высокоспинового состояния в низкоспиновое.

Комплементарное применение поляризационной нейтронной и резонансной рентгеновской магнитной рефлектометрии для исследования сверхрешеток Fe/Cr/Gd

М.В. Рябухина, Е.А. Кравцов, Д.В. Благодатков, Л.И. Наумова, В.В. Проглядо

Институт Физики Металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Межслойное обменное взаимодействие в металлических магнитных сверхрешетках представляет большой физический интерес и активно исследуется в последние годы. Многослойные системы на основе 3d и 4f металлов, например, Fe/Gd – популярные модельные системы, проявляющие уникальные магнитные свойства. До настоящего времени исследовалось, в основном, прямое обменное взаимодействие слоев 3d и 4f металлов и имеются лишь единичные работы по взаимодействию 3d и 4f магнитных металлов через немагнитную прослойку [1]. В настоящей работе мы сообщаем о результатах исследования межслойного обменного взаимодействия в сверхрешетках Fe/Cr/Gd, выполненных с помощью поляризационной нейтронной (ПНР) и резонансной рентгеновской магнитной рефлектометрии (PPMP).

Серия сверхрешеток Fe(35 Å)/Cr(t)/Gd(50 Å), $t = 0 - 60$ Å, была выращена методом магнетронного распыления на подложках (001)Si. Рентгеновские исследования проводились на станции 4-ID-D (APS, ANL), нейтронные – на установке РЕМУР (ОИЯИ). На Рисунке 1 представлены спектры PPMP и циркулярного магнитного дихроизма (XMCD), измеренные при различных температурах на образце с толщиной прослойки Cr $t = 4.4$ Å.

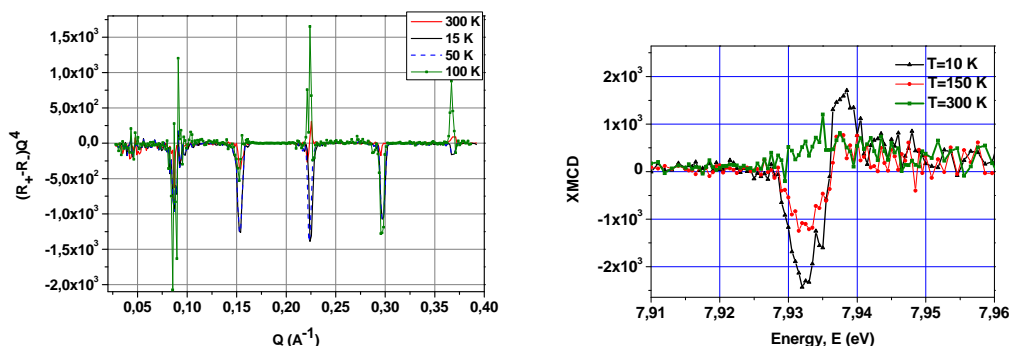


Рис. 1 (а) Спектры PPMP (а) и XMCD (б) от образца Fe(35 Å)/Cr(4.4 Å)/Gd(50 Å), измеренные при различных температурах.

Из анализа данных следует, что величина магнитного момента слоев Gd существенно уменьшается с ростом температуры, а его направление меняется на противоположное.

Работа выполнена при частичной поддержке УрО РАН (программа ОФН РАН « Спиновые явления в твердотельных наноструктурах и спинтроника», проект № 12-T-2-1011), Минобрнауки РФ (проект № 8682), РФФИ (гранты №12-02-12054_офи_м и 12-02-31563_мол_а) и программы поддержки ведущих научных школ НШ-6172.2012.2.

1. B. Sanyal, C. Antoniak, et al., J. PRL 104, 156402 (2010).

Исследование структурных изменений в молекулярном кристалле PuHBF_4 при высоком давлении

*Я.И. Сагань^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, Д.П. Козленко¹, J.W. Wąsicki³,
W. Nawrocik³, P. Czarnecki³, Б. Н. Савенко¹*

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³Университет им. А.Мицкевича, Познань, Польша

К числу актуальных задач современной физики конденсированного состояния относится изучение структуры и атомной динамики кристаллов, содержащих молекулярные ионы. Одними из таких соединений являются соли пиридина. Многие соли пиридина относятся к группе молекулярно-ионных кристаллов с межионными водородными связями. В зависимости от симметрии и размера анионов, эти соединения проявляют большое разнообразие интересных явлений – фазовые переходы, сегнетоэлектричество и динамический ориентационный беспорядок катионов пиридина. Научный интерес к исследованию солей пиридина связан с открытием сегнетоэлектрического состояния в PuHBF_4 при $T=238$ К. В данной работе были изучены изменения в кристаллической структуре PuHBF_4 при высоком давлении методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-12 реактора ИБР-2 (г. Дубна, ОИЯИ).

Исследования были проведены при комнатной температуре и диапазоне давлений 0,1-1,3 ГПа. Установлено, что в соединении PuHBF_4 при высоких давлениях наблюдается структурный фазовый переход из ромбоэдрической фазы с пространственной группой $R\bar{3}m$ в моноклинную фазу с пространственной группой $P2_1$. Получены барические коэффициенты для параметров и объема элементарной ячейки тетрафторбората пиридина.

Работа поддержана грантом РФФИ №11-02-00416-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 в рамках Федеральных целевых программ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

Исследование силикатных стекол, допированных оксидами церия и титана с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов

С.А. Самойленко¹, С.Е. Кичанов¹, Д.П. Козленко¹, Б.Н. Савенко¹,
Г.П. Шевченко², В.С.Гурин², В. Гарамус³, Л.А. Булавин⁴

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь

³GKSS, Geesthacht, Германия

⁴Киевский национальный университет им. Тараса Шевченка, Киев, Украина

Перспективными материалами для оптических приборов являются наноструктурные оксидные системы, в частности, силикатные стекла содержащие оксиды церия и титана. Такие стекла характеризуется высокой радиационной и термической стабильностью, что открывает широкие возможности их применений в промышленности и индустрии [1].

Добавление оксидов церия и титана обуславливает желто-оранжевую окраску, что не соответствует интегральной составляющей от парциального вклада отдельных ионов. Этот эффект можно объяснить формированием сложных Се-Ti-O кластеров, морфология и свойства которых пока не изучены. Для исследования структуры таких кластеров был проведен эксперимент по малоугловому рассеянию нейтронов [2].

В эксперименте исследовались силикатные стекла с различным содержанием оксидов. Установлено, что при повышении относительной концентрации $\text{CeO}_2/\text{TiO}_2$ средний размер кластеров возрастает, причем нелинейно. Установлена корреляция между структурными особенностями кластеров и оптическими характеристиками вышеуказанных стекол.

Работа выполнена при поддержке гранта БРФФИ-ОИЯИ №X12Д-005, гранта РФФИ №12-02-31819-мол-а, госконтрактов №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 в рамках Федеральных целевых программ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

1. H. Chandler. Mater.Sci.Eng.R. 49, 113-155 (2005).
2. H. B. Stuhmann, N. Burkhardt, G. Dietrich, R. Jünemann, W. Meerwinck, M. Schmitt, J. Wadzack, R. Willumeit, J. Zhao, K. H. Nierhaus. Nucl. Instr. & Meth. A, **356** 133 (1995)

Эхо явления в нейтронной и мюонной спиновой спектроскопии как метод исследования новых материалов и структур

Н.М. Сулейманов

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КНЦ РАН, Казань, Россия

Хорошо известно, что эффект спинового эха открытый в ЯМР [1] существенно расширил возможности магнитного резонанса и привел к появлению ЯМР высокого разрешения. Эхо сигнал, который возникает при наложении на исследуемый образец $90^0 - \tau - 180^0$ радиочастотной импульсной последовательности, где τ – временная задержка между импульсами, несет в себе информацию как о статическом распределении, так и динамических флуктуациях внутренних магнитных полей в веществе. Мюонное спиновое эхо может быть индуцировано аналогично методу ЯМР [2]. Однако существует ряд ограничений, которые сдерживают развитие эхо спектроскопии на мюонах. Прежде всего, это короткое время жизни мюона, которое составляет 2.2 микросекунды, и проблема нагрева образца если радиочастотные импульсы должны быть приложены после каждого мюона попадающего в образец в случае непрерывного мюонного пучка. В работе рассматривается метод генерации мюонного спинового эха в нулевом магнитном поле, использующем импульс постоянного магнитного поля и импульсный мюонный пучок [3]. Эксперименты были проведены на образцах порошкообразного бора и полупроводниковом соединении InP, как при комнатной, так и низких температурах. Нейтронное спиновое эхо представляет собой метод высокого разрешения неупругого рассеяния нейтронов и основан на концептуально другом подходе. Метод основан на прямом определении изменения скорости нейтрона используя Ларморовскую прецессию спина нейтрона [4], что обеспечивает высокое разрешение независимо от монохроматизации нейтронного пучка и его интенсивности. Рассмотрены приложения мюонного и нейтронного спинового эха для исследования спиновой динамики и релаксационных процессов в новых материалах и структурах.

Работа частично поддержана программой ОФН РАН II.5.«Физика новых материалов и структур», проект В24.

1. E.L. Hahn, Phys. Rev. 80, 580(1950).
2. S.R. Kretzman, D.I. Williams, N. Kaplan, J.W. Brewer, Phys. Rev. Lett., 61, 2890 (1988)
3. N.M. Suleimanov, S.A. Moiseev, M.A. Clark-Gayther, S.P. Coutrell, S.F.J. Cox, Physica B, 289-290, 676 (2000)
4. F. Mezei (Ed.), Lecture notes in Physics, vol. 128, Neutron spin echo, Springer, Berlin, 1980

Влияние размерного эффекта на фазовые переходы в KNO_3

М.С. Серегин^{1,2}, Ю.А. Кумзеров¹, А.А. Набережнов^{1,2}, Е.Ю. Королева^{1,2},
А.П. Шаганов², А. Franz³, М. Tovar³

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

³Helmholtz Zentrum Berlin, Berlin, Germany

В последние годы сегнетоэлектрические материалы в ограниченной геометрии привлекают пристальное внимание благодаря их свойствам, существенно отличающимся от обычных массивных материалов.

Известно, что тонкие пленки KNO_3 являются сегнетоэлектриком при гораздо более низких температурах (вплоть до комнатной температуры) [1], чем массивный материал, а также обладают свойствами, делающие их привлекательным материалом для создания FeRAM на их основе: квадратные петли гистерезиса, низкий потенциал (5 В) и малое время переключения (20 нс) [2].

Представлены результаты рентгеновских и нейтронных дифракционных измерений, а также диэлектрические спектры для наноструктурированных образцов, полученных введением KNO_3 в пористые стекла со средним диаметром пор 320, 46 и 7 нм. Материал вводился в поры как из расплавленного состояния, так и из водного раствора.

Показано, что в образце, полученном введением KNO_3 из расплава в пористые стекла со средним диаметром пор 7 нм, γ -фаза становится стабильной не только при комнатной температуре, но и сохраняется при дальнейшем понижении температуры вплоть до 100 К. При введении материала из раствора, температура которого не превышала температуру фазового перехода из α в β фазу, при комнатной температуре СЭ фазы не наблюдается, т.е. температурная предыстория образца, в данном случае способ введения KNO_3 в поры стеклянных матриц, влияет на температурный диапазон стабильности СЭ фазы. Для KNO_3 в пористых стеклах со средним диаметром пор 46 нм получена диаграмма процентного соотношения фаз α , β и γ в зависимости от температуры.

Работа поддержана грантами РФФИ и Минобрнауки.

1. J.P.Nolta, N.W.Schubring, R.A.Dork. Ferroelectricity, edited by E.F.Weller.Elsevier, Amsterdam (1967).pp.269-291.
2. C.Araujo, J.F.Scott, R.B. Godfrey,L.McMillan.Appl.Phys.Lett. 48, 1439(1986).

Киральная асимметрия геликоидальной спиновой сверхструктуры Ho/Y

V.V. Tarnavich¹, D. Lott², V. Karaklis³, С.В. Григорьев^{1,4}

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

² *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

³ *Uppsala University, Uppsala, Sweden*

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

Киральность геликоидальных магнитных структур кристаллов, не имеющих кристаллографического центра инверсии, определяется знаком антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мория (ДМ). В то же время в материалах с наличием кристаллографического центра инверсии право- и лево-сторонние спирали энергетически эквивалентны. Подобное вырождение можно снять. Так в многослойной сверхструктуре Dy/Y (где Dy является планарным магнетиком со спиральной структурой) было обнаружено нарушение киральной симметрии. Было установлено, что при охлаждении образца ниже T_N в магнитном поле, приложенном в его плоскости, меняется соотношение между левыми и правыми спиралями.

Эксперименты по рефлектометрии поляризованных нейтронов на Ho/Y сверхструктурах также демонстрируют нарушение киральной симметрии, связанное с приложением внешнего магнитного поля. Пять образцов с последовательностью слоёв $[\text{Ho}_{42} \text{ \AA} / \text{Y}_{30} \text{ \AA}]_{20}$ (S1), $[\text{Ho}_{30} \text{ \AA} / \text{Y}_{30} \text{ \AA}]_{20}$ (S2), $[\text{Ho}_{30} \text{ \AA} / \text{Y}_{15} \text{ \AA}]_{20}$ (S3), $[\text{Ho}_{20} \text{ \AA} / \text{Y}_{30} \text{ \AA}]_{20}$ (S4) и $[\text{Ho}_{60} \text{ \AA} / \text{Y}_{30} \text{ \AA}]_{20}$ (S5) были выращены как монокристаллы методом молекулярно-лучевой эпитаксии вдоль гексагональной оси c $[001]$ Ho и Y. Для формирования магнитной структуры с неодинаковой заселённостью левых и правых спиральных доменов образец охлаждался в магнитном поле до температур T ниже T_N (FC режим). Среднее значение киральности, пропорциональное разности числа левых и правых спиралей, измеряли как поляризационно-зависимую часть магнитного рассеяния нейтронов: $\gamma = (\Gamma^+ - \Gamma^-) / (\Gamma^+ + \Gamma^-)$, где $\Gamma^{+/-}$ - интегральные интенсивности отражённых нейтронов с поляризацией вдоль или против направления ведущего магнитного поля.

Установлено, что при охлаждении в нулевом поле параметр киральности γ равен 0. С увеличением магнитного поля в режиме FC охлаждения γ растёт для образцов S1, S3 и S4, в то время как для S2 и S5 γ остаётся близким к 0. Отличный от нуля γ для S1, S3 и S4, и $\gamma = 0$ для S2 и S5 наблюдается на температурной зависимости $\gamma(T)$, полученной после охлаждения в FC режиме. Нарушение равновесной заселённости левых и правых спиралей, предположительно, связано с возникновением на границе раздела взаимодействия ДМ. Разница в поведении параметра γ определяется толщиной слоёв Ho и Y.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-02-01125-а и в рамках государственных контрактов No.02.740.11.0874 и 07.514.12.4003.

Изучение реорганизации кластеров в растворе C_{60}/N -метилпирролидон/вода методами малоуглового рассеяния нейтронов и динамического светорассеяния

А.А. Томчук^{1,2}, О.А. Кизима^{1,3}, М.В. Авдеев¹, Т.В. Тропин¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Тульский государственный университет, Тула, Россия

³ Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

Кластерообразование в растворах фуллеренов является сегодня одной из актуальных проблем коллоидной химии [1]. Изучение растворов фуллеренов имеет как фундаментальный (информация о кластерном состоянии вещества), так и прикладной интерес. Последний, в частности, связан с биологической активностью фуллеренов, что обуславливает поиск водорастворимых и устойчивых форм данных высокосимметричных молекул.

В работе анализируются данные динамического светорассеяния (ДСР) на кластерных растворах фуллерена C_{60} в N -метилпирролидоне (НМП) и его смеси с водой. Рассмотрены более свежие (две недели), чем ранее, исходные растворы C_{60}/NMP , где более надежно регистрируется эффект реорганизации кластерного состояния при добавлении воды. На основе полученных из ДСР функций распределения кластеров по размеру рассчитаны модельные кривые малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), которые сравниваются с доложенными ранее экспериментальными данными [1-3].

Подтверждено, что кластеры в C_{60}/NMP развиваются в течение одного месяца с последовательным увеличением их размера. Данные ДСР показывают, что уже для растворов C_{60}/NMP с возрастом от двух недель наблюдается сильный эффект реорганизации кластерного состояния при добавлении воды. Это, в свою очередь, указывает на то, что к этому времени в начальном растворе образуются модифицированные комплексы C_{60} -НМП, ответственные за растворение фуллерена в смеси. Детектируемые на данном этапе с помощью ДСР кластеры фуллерена существенно отличаются по размерам от кластеров в старых (месяц и более) растворах C_{60}/NMP . Моделирование и сравнение с экспериментальными данными МУРН указывает на возможность отслеживания развития кластеров в исходных растворах с помощью МУРН на более ранних стадиях роста, чем исследовалось до сих пор [4].

1. М. В. Авдеев, В. Л. Аксенов, Т. В. Тропин, ЖФХ. 1405, 84 (2010).
2. О. А. Кузума, L. A. Bulavin, V. L. Aksenov, et. al., Mat. structure. 17, 15 (2008).
3. V. L. Aksenov, M. V. Avdeev, T. V. Tropin, et.al., Physica B. 795, 385 (2006).
4. А. А. Казначеевская (Томчук), О. А. Кизима, Л. А. Булавин и др., Поверхность. (2013), принята.

Исследование мезоструктуры порошков $Y(OH)CO_3$ осажденных из растворов с различной концентрацией нитрата иттрия

*И.Г. Чувашова*¹, *А.С. Ванецев*³, *Г.П. Копица*⁴,
*Баранчиков А.Е.*², *О.М. Гайтко*^{1,2}, *В.М. Гарамус*⁵

¹ МГУ М.В. Ломоносова, Москва, Россия

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

³ Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia

⁴ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия,

⁵ Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Germany, Geesthacht

Монодисперсные коллоидные частицы контролируемой формы и размера находят широкое применение при создании оптических и магнитных материалов. В последнее время стабильные суспензии монодисперсных частиц используются в таких областях, как адресная доставка лекарств и нанесение биологических меток. На данный момент существует много различных подходов к синтезу монодисперсных коллоидных частиц, наиболее перспективный из них связан с использованием методик гомогенного осаждения для частиц неорганических веществ и техники эмульсионной полимеризации для полимерных материалов.

Основной целью настоящей работы являлось изучение влияния концентрации исходных реагентов (раствора нитрата иттрия) на мезоструктуру монодисперсных порошков гидроксокарбонатов иттрия $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$, характеризующиеся частицами сферической формы и получаемых в ходе медленного гидролиза в присутствии мочевины при микроволновом воздействии.

В ходе настоящей работы было проведено детальное исследование влияния мольного избытка концентрации ионов Y^{3+} в исходном растворе на мезоструктуру монодисперсных порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$, с помощью методов малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), растровой электронной микроскопии и низкотемпературной адсорбции азота. Измерения МУРН были проведены на установке малоуглового рассеяния нейтронов SANS-1 (реактор FRG1, GKSS Research Centre, Geesthacht, Germany). Использование нейтронов с длиной волны $\lambda = 8.19 \text{ \AA}$, $\Delta\lambda/\lambda = 10\%$ и четырех дистанций образец-детектор ($SD = 0.7, 1.8, 4.5$ и 9 м) позволяло измерять интенсивность рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $5 \cdot 10^{-2} < q < 2.5 \text{ нм}^{-1}$. Рассеянные нейтроны регистрировались двумерным позиционно-чувствительным 3He детектором.

Комплексный анализ полученных данных позволил установить существенное влияние концентрации водных растворов нитрата иттрия как на процессы формирования и роста первичных зародышей, так и их агрегации. Показана возможность направленного формирования микроморфологии синтезируемых порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$ с частицами заданного размера в диапазоне 50-500 нм.

Нейтронные исследования структурных дефектов ВТСП материалов на основе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

Е.В. Яковенко, Е.С. Коваленко

НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

Благодаря высокой проникающей способности нейтронов нейтронные методы исследования являются уникальным неразрушающим инструментом контроля массивных технических изделий и материалов. Одним из важных приложений этого инструмента является структурная диагностика ВТСП материалов для развития отечественных технологий производства сверхпроводниковых изделий второго поколения (ВТСП-2G).

В нашей работе на исследовательском реакторе ИР-8 в НИЦ КИ были изучены монокристаллические и керамические ВТСП материалы на основе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, используемые, соответственно, для производства ВТСП магнитов и мишеней для лазерного напыления ленточных сверхпроводников. Методом нейтронной радиографии были выявлены такие макроскопические дефекты, как внутренние трещины и примесные зоны в монокристаллах, и, что особенно важно, была установлена сильная (до 20%) неоднородность распределения плотности в керамических лазерных мишенях. Лауэграфические исследования монокристаллов выявили целый набор структурных состояний от монокристалла высокого качества до мозаики с углом разориентации блоков порядка 5° ; отдельные блоки мозаики были также визуализованы на радиографических изображениях кристаллов за счет дифракционного контраста. В отдельных случаях образец представлял собой полностью разупорядоченный сросток кристаллитов.

Проведенные исследования показали информативность существующих на ИР-8 нейтронных методов структурной диагностики, важной для отработки технологий производства ВТСП-2G материалов высокого качества.

Секция «Структура и свойства материалов»

Магнитная структура соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ в широком диапазоне температур

*Е.В. Алтынбаев^{1,2}, Н.М. Попова¹, S.-A. Siegfried³, В.А. Дядькин^{1,4},
Е.В. Москвин^{1,2}, В. Дмитриев⁴, D. Menzel⁵, Ch. Dewhurst⁶, А.В. Цвященко⁷,
Д. Чернышев⁴, С.В. Григорьев^{1,2}*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴Swiss-Norwegian Beamlines at the ESRF, Grenoble, France

⁵Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany

⁶Institute Laue-Langevin, Grenoble, France

⁷Институт физики высоких давлений, Троицк, Россия

Магнитная подсистема соединений $MnGe$ и $FeGe$ с кубической структурой типа B20 упорядочивается в геликоидальную спиновую структуру с малым волновым вектором: при низких температурах $k \approx 2.3 \text{ nm}^{-1}$ для $MnGe$ и $k \approx 0.09 \text{ nm}^{-1}$ для $FeGe$ [1-3]. Геликоидальная структура появляется в результате антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мории (DM), обусловленного отсутствием центра симметрии в расположении магнитных атомов [4, 5]. Нами были синтезированы образцы смешанных соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0; 0,25; 0,50$. Температурную эволюцию магнитной структуры исследовали методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Для всех образцов в области низких температур ниже T_{C1} (105 К для $x = 0$; 60 К для $x = 0.25$; 130 К для $x = 0.50$) наблюдается одиночный Брэгговский рефлекс с максимумом при $Q=k_1$. При температурах выше T_{C1} , этот пик разделяется на два при $Q=k_1$ и $Q=k_2$, причем значения их волновых векторов удовлетворяют соотношению $k_1 = 2k_2$ во всем температурном диапазоне вплоть до $T = T_{C2}$ (235 К для $x = 0$; 180 К для $x = 0.25$; 200 К для $x = 0.50$). Абсолютные значения волновых векторов k_1 и k_2 уменьшаются до нуля с ростом температуры от T_{C1} до T_{C2} . При температурах выше T_{C2} два пика формируют один пик диффузного рассеяния на критических флуктуациях с центром при $Q = 0$, который описывается функцией Лоренца. Это диффузное рассеяние исчезает при дальнейшем увеличении температуры. Критические температуры T_{C1} и T_{C2} соответствуют точкам перегиба температурных зависимостей магнитной восприимчивости $\chi(T)$ для этих соединений.

1. N. Kanazawa, et al., Phys. Rev. Lett. 106, 156603 (2011).
2. O.L. Makarova, et al., Phys. Rev. B 85, 205205 (2012).
3. B. Lebech, J. Bernhard, T. Freltoft, 1989 J. Phys. Condens. Matter 1 6105
4. I.E. Dzyaloshinskii, 1964 Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46 1420.
5. P.Bak, M.H.Jensen, 1980 J.Phys. C13 L881.

Исследование внутренней структуры сферических частиц диоксида кремния, формирующего фотонные кристаллы и фотонные стёкла

*М.И. Арефьев¹, Н.А. Григорьева¹, А.А. Мистонов¹, К.В. Ездакова²,
Г.П. Копица², С.В. Григорьев^{1,2}*

¹Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

²Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Нано-объекты, выращенные из монодисперсных сферических частиц диоксида кремния привлекают в течении последнего десятилетия большое внимание благодаря возможности их использования для управления светом, а также перспективных приложений в фотонике [1-4]. Ключевыми для этих объектов факторами является структурное упорядочение и внутренняя структура частиц. Для данной работы монодисперсные частицы SiO₂ диаметром D = 250 нм - 2.2 мкм были выращены методом Штобера-Финка [10]. Исследование внутренней структуры проводилось при помощи четырёх комплиментарных методик: ультрамалоуглового (USAXS) и малоуглового рассеяния синхротронного излучения (SAXS), малоуглового рассеяния нейтронов (SANS) и сканирующей электронной микроскопии. Совместное использование этих методик позволило провести исследование в широком диапазоне переданных импульсов [Рис.1]. Было показано, что полная кривая рассеяния состоит из трёх частей: рассеяние от крупных частиц (D > 250 нм), пропорциональное форм-фактору, рассеяние от частиц меньшего размера (D ≈ 15 нм), с появлением брэгговского пика, а также фоновое рассеяние. Полученный результат говорит о наличии некоторого упорядочения частиц меньшего размера. Это может быть объяснено тем, что крупные частицы представляют собой плотноупакованные частицы меньшего размера и, при этом, не образуется частиц промежуточного размера.

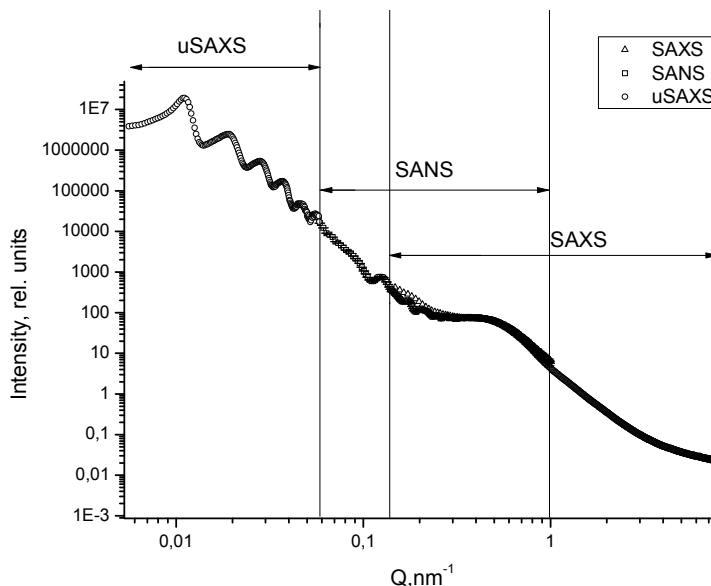


Рис. 1. Дифрактограмма для образца с внешним диаметром 700 нм

1. S. Wiersma, Nature Physics, **4**, 359 (2008).
2. J. S. Fallert, R. J. B. Dietz, *et al.*, Nature Photonics **3**, 279 (2009)
3. H.E. Türeci, Li Ge, S. Rotter, *et al.*, Science, **320**(5876), 643 (2008).
4. P.D. Garcia, *et al.*, Advanced materials, **22**(1), 12 (2010).
5. W. Stöber, A.Fink, E.Bohn, Journal of Colloid and Interface Science, **26**, 62 (1968).

Изучение термомеханических свойств быстрозакаленных лент сплавов $Ni_{50}Mn_{21}Al_{22-x}Si_x$ ($x = 0; 0.5; 1; 3$)

*Е.С. Бармина¹, М.В. Горшенков¹, М.В. Лянге¹, В.В.Ховайло¹, В.В. Коледов²,
Д.С. Кучин², Р. Чаттерджи³*

¹ Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС» Москва, Россия

² Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия

³ Индийский Институт Технологий Дели, Нью-Дели, Индия

В данной работе рассматриваются зависимости изгибной деформации от температуры быстрозакаленных лент $Ni_{50}Mn_{21}Al_{22-x}Si_x$ ($x = 0; 0.5; 1; 3$). Образцы были получены методом спиннингования. Термомеханические свойства быстрозакаленных лент исследовались по температурным зависимостям изгибной деформации в интервале температур от 290К до 430К. Измеренные зависимости демонстрируют гистерезис по температуре, что характерно для сплавов с памятью формы. На рис. 1 показано, как определялись характеристические температуры прямого (M_S и M_F) и обратного (A_S и A_F) мартенситных превращений и обратимая деформация ϵ .

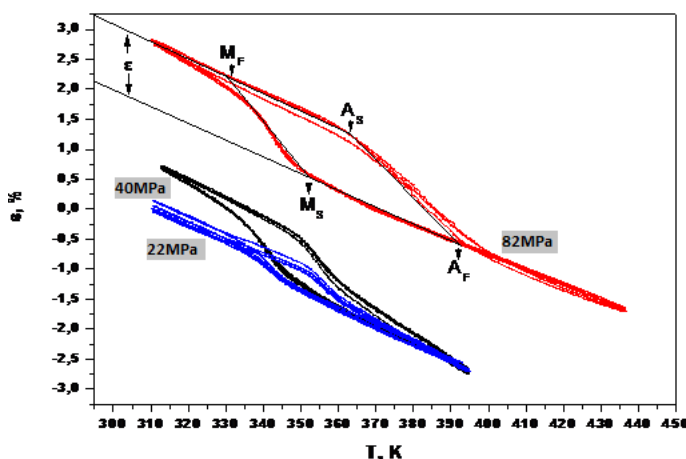


Рис. 1 Зависимость изгибной деформации для образца $Ni_{57}Mn_{21}Al_{21.5}Si_{0.5}$.

Несмотря на то, что образцы были получены методом быстрой закалки и после приготовления не подвергались термообработке, в них присутствует значительная часть кристаллической фазы, которая претерпевает мартенситное превращение при изменении температуры. Об этом свидетельствуют характерные гистерезисные зависимости на графиках $\epsilon=f(T)$ (см. рис. 1).

Дополнительные исследования показали, что помимо односторонней памяти формы в образцах наблюдается эффект двухсторонней памяти формы.

О стабильности кремниевых нанокластеров, пассивированных атомами водорода

В.С. Батурич¹, С.В. Лепешкин¹, Н.Л. Мацко¹

¹Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

Нанокластеры кремния являются перспективными объектами для применения в нанoeлектронных устройствах. В частности, благодаря возможности согласования с существующей элементной базой на основе кремния

Нашей задачей было определение фазового состава такой смеси. Имея рассчитанные с помощью эволюционного алгоритма структуры кластеров-компонент смеси, нами был разработан алгоритм определения энергии реакции и фазового состава смеси при заданной концентрации пассивирующих атомов, основанный на использовании методов линейного программирования.

Наиболее важные результаты:

1) Зависимость энергии реакции от степени пассивации $2m$ имеет нерегулярный характер (рис. 1).

2) При стабильных химических составах в ансамбле кластеров образуются только кластеры одного типа (Si_{10} , $Si_{10}H_{14}$, $Si_{10}H_{16}$ или $Si_{10}H_{22}$) (рис. 2). При других составах ансамбль состоит из бинарной смеси ближайших по составу стабильных кластеров

3) Наиболее стабильной является структура с минимальным числом разорванных ковалентных связей.

$$E_{react} = E(Si_{10}H_{2N}) - E(Si_{10}) - N \times E(H_2)$$

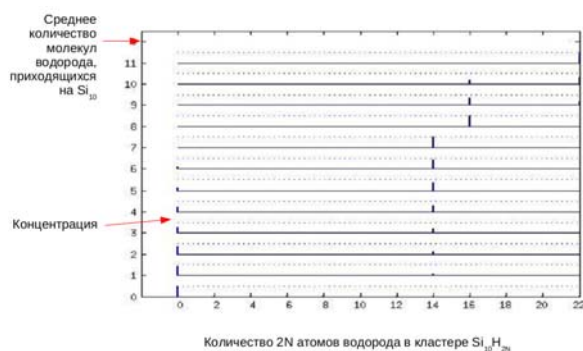


Рис. 1

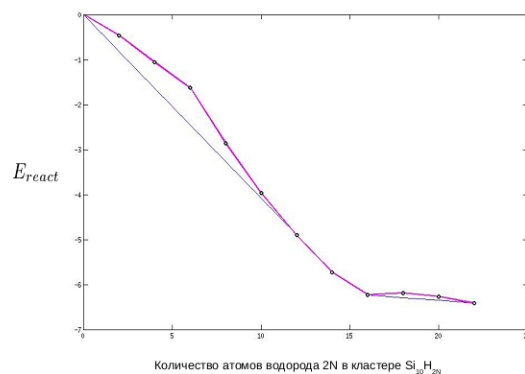


Рис. 2

Термическая стабильность и структура аморфного сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$

Т.В. Куликова¹, В.А. Быков¹, С.А. Упоров¹

¹ Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В последнее время уделяется большое внимание металлическим стеклам на основе алюминия, содержащих обычно 5-15 ат.% процентов переходного металла (Fe, Co, Ni) и 3-6 ат.% процентов редкоземельного металла (Ce, Yb, Dy и др.). Согласно многочисленным исследованиям данных аморфных сплавов, после первичной кристаллизации их структура может состоять из аморфной матрицы и наночастиц алюминия. Выяснение механизмов зарождения нанокристаллической фазы в аморфных сплавах алюминий-редкоземельный -переходный металл является важнейшей задачей для разработки методов контролируемого получения быстрозакаленных сплавов с заданными служебными характеристиками и структурой.

Цель данной работы — исследование процессов кристаллизации, термических свойств и структурного состояния аморфного сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ (ат.%).

Аморфный сплав $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ был получен методом спиннингования в виде ленты шириной 7 мм и толщиной 40 мкм. Для исследования структуры и термической стабильности использовались следующие методы: синхронный термический анализ (прибор STA 409 Luxx, Германия) и просвечивающая электронная микроскопия (прибор JEOL JEM 2100, Япония). Результаты исследований дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) представлены на рис. 1.

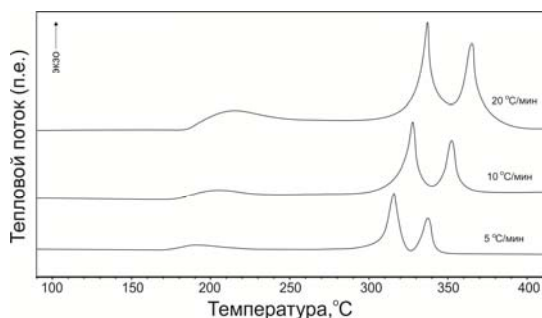


Рис. 1. ДСК кривые аморфной ленты $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$

Из микроскопического анализа следует, что в результате аморфизации в сплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ образовались кластеры глобулярной формы со средним размером 2.5-3 нм.

Таким образом, в результате проведенных исследований установлены температурный интервал стабильности аморфного сплава, процесс кристаллизации и структурный состав сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ после аморфизации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 11-03-00469-а

Влияние условий структурообразования на свойства керамик BST

И.А. Вербенко

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

В последнее время отмечается стремительное развитие контрольно-измерительной аппаратуры нового поколения, основным элементом которой являются электрически перестраиваемые устройства миллиметрового и субмиллиметрового диапазонов (фазовращатели (ФВ), линии задержки, резонаторы, фильтры) на базе многослойных композитов, состоящих из тонких (вплоть до наноразмерных) сегнетоэлектрических (СЭ) плёнок. В качестве «мишеней» (катодов) для получения BST-плёнок для ФВ в основном используют композиции $(\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2})\text{TiO}_3$ или $(\text{Ba}_{0,7}\text{Sr}_{0,3})\text{TiO}_3$, что связано с реализацией в них наименьших потерь, вызванных переключением поляризации и, как следствие, максимальных значений коэффициента качества, K , (отношением дифференциального фазового сдвига к уровню вносимых потерь).

Учитывая известную чувствительность свойств сложных оксидов со структурой типа перовскита к термодинамической предыстории [1], а также полученные в последнее время данные о термостимулированной поверхностной наносегрегации химического состава в этих средах [2-4], очевидна необходимость более детального выбора оптимальных условий приготовления крупногабаритных BST-«мишеней» (катодов). Это и стало предметом настоящего исследования.

Анализ результатов зависимостей структурных параметров и зёрненного строения от состава керамик, а также особенностей фазообразования при изготовлении поликристаллических BST-содержащих компонентов позволил установить, что критическая зависимость свойств BST-керамик от условий их получения определяется, прежде всего, влиянием жидких фаз на особенности рекристаллизационного спекания объектов. Выявлены корреляции между характером строения керамических заготовок (мишеней) и термочастотными зависимостями диэлектрических характеристик объектов исследования.

1. Л.А. Резниченко, Л.А. Шилкина, и др., Неорган. материалы. 573. 4. 5. (2005).
2. Ю.Я. Томашпольский, ЖОХ. 678. 72. 4. (2002).
3. Ю.Я. Томашпольский, Н.В. Садовская, Неорган. материалы. 735. 42. 6. (2006)
4. Ю.Я. Томашпольский, Н.В. Садовская, Неорган. материалы. 1212. 42. 10. (2006).

Исследование усталостных свойств микрокристаллических сплавов системы Al-Si

Ю.П. Вишня, В.Н. Чувильдеев, М.Ю. Грязнов, А.Н. Сысоев

НИФТИ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

Цель работы состоит в изучении усталостных характеристик МК сплава Al-20%Si, изготовленного литьем и по спрей-технологии (spray forming) и прошедших затем обработку РКУ-прессованием в диапазоне температур от 20 до 350 °С. Для проведения испытаний на усталость был использован автоматизированный комплекс ПИУ-3 [1], разработанный в НИФТИ ННГУ. Установлено, что предел выносливости исследуемых материалов существенно зависит от температуры испытаний: для сплава спрей-РКУП-Al-20%Si уменьшается от 140 до 75 МПа, а для сплава литой-РКУП Al-20%Si от 140 до 20 МПа при увеличении температур от 25 до 350 °С.

Построена теоретическая модель, объясняющая поведение усталостных характеристик МК Al-Si сплавов.

1. Сысоев, А.Н. Усталостные свойства нано- и микрокристаллических алюминиевых сплавов: новый метод испытаний и результаты экспериментальных исследований /А.Н. Сысоев, М.Ю. Грязнов, В.Н. Чувильдеев, В.И. Копылов.-Вестник ННГУ, 2010. - №5, с. 46-52.

Изучение магнитных свойств сплавов системы Fe-Cr-Co с пониженным содержанием кобальта

Т.А. Вомпе, И.М. Миляев, В.С. Юсупов

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

Сегодня постоянные магниты Fe-Cr-Co находят широкое применение в производстве [1]. Снижение содержания кобальта, как самого дорого компонента, при сохранении практически постоянного уровня магнитных свойств, является актуальной задачей.

Цель данной работы – изучить влияние кобальта и легирующих элементов на формирование магнитных свойств сплавов системы Fe-Cr-Co с пониженным содержанием кобальта. В частности, понять роль кобальта в механизме формирования высококоэрцитивного состояния. Для исследования был выбран сплав Fe-28%Cr-10%Co-2%Mo-0,5%Si. Влияние химического состава на магнитные свойства изучали методом планирования эксперимента.

Для приготовления порошковых образцов использовали порошки железа (марки ВС), хрома (ПХС-1), кобальта (ПК-1У, ГОСТ 9721-79), молибдена и кремния. Смешивание проводили в турбулентном смесителе С2.0, одностороннее прессование – на ручном прессе в разъёмной матрице с внутренним диаметром 13,6 мм при давлении 600 МПа. Спекание проводили в вакуумной шахтной печи СШВ-1,25/24-И1 в вакууме 10^{-2} Па при температуре 1420 °С 2,5 часа. Относительная плотность готовых образцов составляла 97,9-99,9 %.

Химический состав образцов после спекания и прессования исследовали с помощью метода рентгенофлуоресцентного анализа на спектрометре с волновой дисперсией ARL OPTIM'X фирмы Thermo Fisher Scientific (Швейцария).

Магнитные свойства изучали на гистерезисографе «Permagraph L».

Полученные ранее данные [2] для других сплавов системы Fe-Cr-Co подтвердились в данной работе. Было показано, что при уменьшении содержания кобальта в сплаве снижается скорость распада высокотемпературного α -твёрдого раствора, коэрцитивная сила больше зависит от содержания хрома и дополнительных легирующих элементов, таких как молибден и вольфрам, чем от содержания кобальта.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-03-31296.

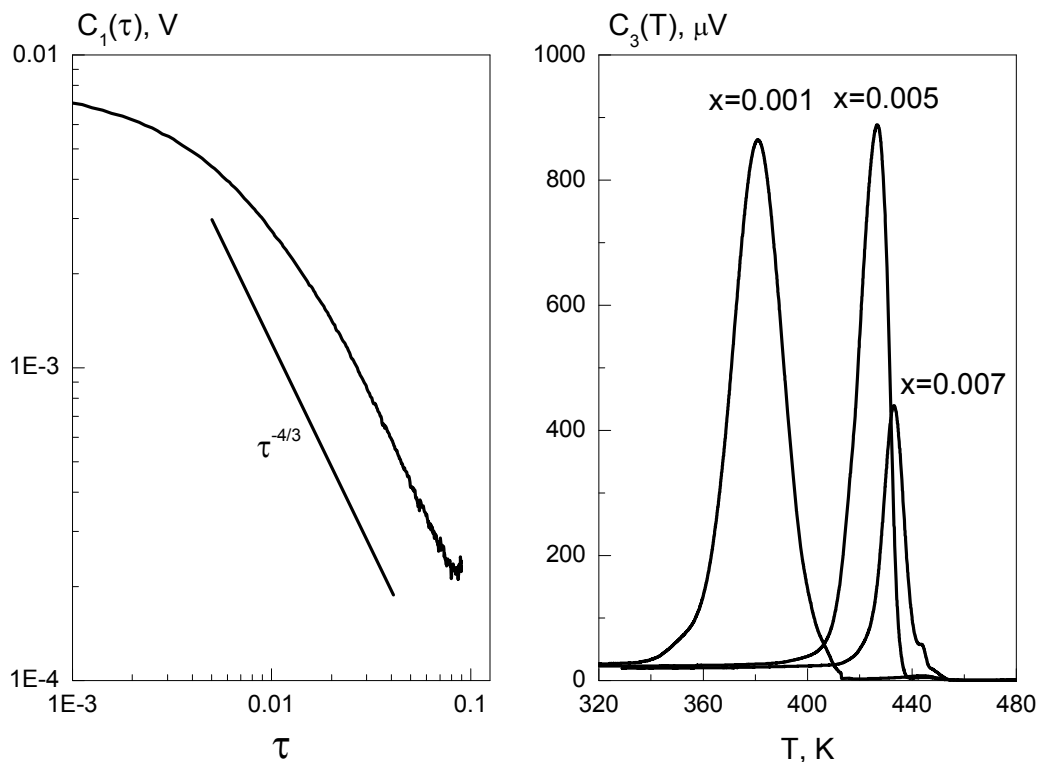
1. Е.В. Артамонов, М.А. Либман и др. Сталь. 2007. № 6. С. 65-68.
2. И.М. Миляев, Т.А. Вомпе и др. Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент: Материалы 8-й Международной научной конференции. 2012. С. 220-223.

Нелинейная магнитная восприимчивость в FeNiC инварах при ферромагнитном фазовом переходе

О.В. Геращенко¹, В.П. Хавронин¹, Е.В. Величко¹, С.В. Григорьев¹

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

В инварных образцах $(\text{Fe}_{0.675}\text{Ni}_{0.325})_{1-x}\text{C}_x$, $x = 0.001, 0.005, 0.007$ изучен линейный и нелинейный отклик намагниченности на слабое внешнее переменное магнитное поле. Обнаружено, что с понижением температуры в этих инварах наблюдается фазовый переход в ферромагнитное состояние с характерным критическим индексом $-4/3$ (см. левый рисунок), а увеличение концентрации углерода существенно увеличивает температуру Кюри T_C (см. правый рисунок, где максимум третьей гармоники намагниченности определяет T_C).



Адсорбционные процессы в условиях воздействия электрических разрядов в решении экологических вопросов тепловых электростанции

Г.Дж. Гусейнов

Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

По данным [1] CO_2 , CH_4 , NO_x , SO_2 в атмосфере за последнее 50 лет существенно выросла. Вместе с тем все большее влияние на окружающую среду стали оказывать гетерогенные химические реакции, вследствие чего отмечается существенно истощение озонового слоя. Таким образом, эксплуатация тепловых электростанций невозможна без обеспечения природоохранных мероприятий.

В настоящей работе приведены результаты исследования по данным вопросам. В их число входят: активация и модифицирование поверхности адсорбентов различными воздействиями, в частности с помощью электрического разряда; управление сорбционными процессами; интенсификация процессов очистки газов и жидкостей; активация реагентов; изучение адсорбционных и десорбционных процессов, происходящих в условиях воздействия электрических разрядов.

В настоящей работе исследованию подвергался природный газ (CH_4), содержащий 8%-й объем CO_2 , 5%-й объем NO_2 , 3%-й объем SO_2 и 2%-й объем H_2S . В качестве адсорбента использовалась смесь адсорбентов $\text{NaX} + \text{CaA}$. Образцы прогревали при температуре 450°C в течение пяти часов в условиях вакуума, затем часть образцов этой партии подвергалась воздействию электрического разряда барьерного вида в течение 10 мин.

В работе разработана методика исследования процесса воздействия электрическим разрядом на сорбцию газов и жидкостей пористыми адсорбентами. Установлен факт электрической зарядки адсорбентов при выдержке в разряде барьерного вида. Выявлены факты повышения эффективности адсорбционных процессов, протекающих в условиях воздействия электрических разрядов. Повышение эффективности адсорбционных процессов в условиях воздействия электрических разрядов связывается с образованием в адсорбентах дополнительных адсорбционных центров в качестве накопившихся электрических зарядов.

Полученные результаты свидетельствуют об эффективности предложенных технологических схем очистительных процессов, обеспечивающих эффективное решение экологической проблемы в случае станции, работающей на природном газе и мазуте.

1. Ф.Я. Ровенский, В.И. Егоров. Озон, окислы азота и серы в нижней атмосфере.– М.: Гидрометеиздат, 1986. – с.183

Определение отношения кислород/металл в легированных оксидах с помощью твердоэлектrolитной гальванической ячейки

Н.А. Иванова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Для оценки характера изменения термодинамических свойств смешанного уран-плутониевого оксидного топлива, имеющего высокую радиоактивность и токсичность, в данной работе проведены измерения аналогичных по свойствам уран-цериевых оксидов.

Порошки оксидов урана и церия ($UO_2 - CeO_2$) получали методом совместного осаждения из смеси азотнокислых растворов, что обеспечивает максимально равномерное распределение легирующего оксида в конечной смеси. Методами порошковой металлургии были приготовлены таблетки на основе диоксида урана, которые имели состав $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{1,999}$.

Особенно эффективным для определения кислородного потенциала и величины нестехиометрии x (или отношения кислород/металл $O/M = 2 \pm x$, где $M = U + Ce$) образца $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{2\pm x}$ в настоящей работе было использование потенциометрического метода измерения электродвижущей силы (эдс) твердоэлектrolитной гальванической ячейки в интервале температур 1123 – 1323 К с применением электрохимического дозированного изменения содержания кислорода в анализируемом образце путем твердофазного кулонометрического титрования при рабочей температуре ячейки (1273 К).

При определении кислородного потенциала нестехиометрического оксида методом эдс анализируемый образец служит одним из электродов твердоэлектrolитной гальванической ячейки. В качестве электрода сравнения используется материал с хорошо известными стабильными значениями кислородного потенциала в рабочем интервале температуры, например, равномолярная смесь Ni – NiO.

Величину кислородного потенциала исследованного образца $\Delta\bar{G}_{O_2}$ определяли из уравнения: $\Delta\bar{G}_{O_2} = 4EF + \Delta\bar{G}_{O_2}^{ref}$, где E – величина эдс ячейки, а $\Delta\bar{G}_{O_2}^{ref}$ – кислородный потенциал электрода сравнения Ni – NiO, значение которого находили из выражения: $\Delta\bar{G}_{O_2}^{ref} = a + b \cdot T$, где $a = -476$ кДж/моль, $b = 0,174$ кДж/моль К, T – температура в К.

Многokратное повторение измерений после каждого изменения нестехиометрии образца $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{2\pm x}$ равновесных значений эдс ячейки, в которой проводилось кулонометрическое окисление или восстановление, дает возможность построить зависимости кислородного потенциала от отношения кислород/металл при различных значениях температуры ячейки T .

Изменение мезопористой структуры упорядоченных опаловых матриц при заполнении кремнезолями, легированными РЗЭ

С.Н. Ивичева, Ю.Ф. Каргин, С.В. Куцев

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

Золь-гель метод в зависимости от условий процесса (исходных реактивов, концентрации, размера частиц, T реакции, pH среды и др.) позволяет получить самые разнообразные по свойствам материалы на основе коллоидного кремнезема. Это могут быть макро- и мезопористые силикагели – носители катализаторов, защитные пленки и мембраны, высокодисперсные порошки и пористые стекла, а также упорядоченные планарные и трехмерные структуры – фотонные кристаллы, оптические среды с периодическим изменением показателя преломления.

Методами коллоидной химии получены трехмерные упорядоченные композиты на основе опаловых матриц и кремнезелей, легированных редкоземельными элементами. Равномерное распределение РЗЭ для предотвращения концентрационного тушения люминесценции было достигнуто многократным заполнением порового пространства опаловой матрицы золями кремнезема легированными солями или оксидами РЗЭ.

Для приготовления устойчивых концентрированных (до 25-27%, в пересчете на SiO_2) кислых ($pH \approx 2$) зольей были использованы тетраэтоксисилан, этиловый спирт, соляная кислота (30% раствор) в мольных соотношениях $Si(OEt)_4:C_2H_5OH:H_2O:HCl = 1:2:(3-4):(0,1-1)$. Оксиды РЗЭ были введены в золь в виде солянокислого раствора из расчета 0,3 масс. %. Структурирование зольей и зольей в порах ОМ проводили при комнатной температуре (T_k) с последующим гелеобразованием в термостате при 50°C. Последующая температурная обработка по заданному режиму способствовала переходу геля в порах ОМ в ксерогель (силикагель) (150°C), а затем в мезопористое стекло (800°C) с равномерным распределением ионов РЗЭ.

Исследованы морфологические и структурные особенности полученных композитов, а так же оптические свойства опаловых матриц, заполненных кремнезолями с РЗЭ.

Экспериментально установлено, что незначительные (10-30 ppm) количества РЗЭ в композитах оказывают влияние на оптические характеристики материала.

Работа выполнена при поддержке Грантов РФФИ № 12-02-00653-а и 13-02-00662.

Исследование электрохимического поведения углеволоконных материалов в водных электролитах для использования в суперконденсаторах

*М.В. Астахов, С.В. Стаханова, А.А. Климонт, Р.Р. Галимзянов,
И.С. Кречетов, Я.А. Меньшиков*

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

В работе были изучены особенности электрохимического поведения углеродных войлока Карбопон В-Актив и ткани Бусофит Т-040 производства ОАО «Светлогорск-Химволокно» (респ. Беларусь), а также войлока с адсорбционной ёмкостью по бензолу 228 мг/г («Войлок-228», Россия).

Исследования методом циклической вольтамперометрии и измерение ёмкости методом гальваностатического заряда-разряда производились на потенциостате-гальваностате Elins P30S (ООО «Элинс», Россия).

При измерениях в 6 М водном растворе H_2SO_4 материалы Бусофит Т-040, Карбопон В-Актив и «Войлок-228» без каких-либо модификаций показали значения ёмкости порядка 120 Ф/г ($3,19 \text{ Ф/см}^2$), 151 Ф/г ($1,09 \text{ Ф/см}^2$) и 104 Ф/г ($1,7 \text{ Ф/см}^2$) при КПД 76 %, 74 % и 60 % соответственно на ячейке площадью $4,9 \text{ см}^2$. Композит «Бусофит Т-040 – Карбопон В-актив» показал характеристики, соответствующие 149 Ф/г ($4,64 \text{ Ф/см}^2$) при КПД 77 %.

Применение в электродных структурах ПАНИ позволило увеличить ёмкость исходных электродных материалов примерно вдвое за счёт псевдоёмкости, вызванной окислительно-восстановительными процессами, сопровождающимися переносом заряда, протекающими между полианилином и электролитом под действием приложенного потенциала, однако при этом наблюдается падение КПД. Так, при измерениях в 6 М водном растворе H_2SO_4 ёмкость возросла до 250 Ф/г, $4,5 \text{ Ф/см}^2$ при КПД 65 % для материала Карбопон В-Актив; до 226 Ф/г, $7,4 \text{ Ф/см}^2$ при КПД 53 % для материала Бусофит Т-040 и до 225 Ф/г, $4,61 \text{ Ф/см}^2$ для материала «Войлок-228» при КПД 45 %. Для композита «Бусофит Т-040 – Карбопон В-Актив» ёмкость возросла до 188 Ф/г, $7,88 \text{ Ф/см}^2$ при КПД 53 %. Электронная микроскопия образцов показала, что ПАНИ образует островки на поверхности волокон различного размера в диапазоне от 1 до 40 мкм.

Таким образом, в работе изучено электрохимическое поведение углеродных войлоков Карбопон В-Актив и «Войлок-228» и ткани Бусофит Т-040 без каких-либо обработок, композита «Бусофит Т-040 – Карбопон В-Актив», а также этих же материалов, модифицированных ПАНИ. Показано, что композиционные материалы обладают ёмкостью в 1,8 – 2,2 раза превышающей характеристики немодифицированных тканей и войлоков.

Разработанные материалы представляются особенно перспективными для формирования электродных структур при создании энергоёмких суперконденсаторов с высокой удельной электрической ёмкостью.

Изменения структуры углеродных материалов при их высокоэнергетической механической обработке

Н.С.Ларионова, Р.М. Никонова, В.В.Аксенова, В.И. Ладьянов

Физико-технический институт УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Высокоэнергетический шаровой размол является эффективным методом как модифицирования поверхности углеродных материалов, реализации в них наноструктурного состояния, так и последующего синтеза на их основе материалов, обладающих уникальными свойствами. Большое внимание уделяется технологиям модифицирования металлов. При этом исследования структурных изменений самих форм углерода в результате механической обработки являются фундаментальными для последующего выбора режимов получения композитов металл-углерод, а также объяснения механизмов их образования.

В работе представлены сравнительные исследования деформационного поведения углеродных материалов. Образцы графита марки ОСЧ 7-2 и смеси фуллеритов С60/70 (~14% С70) подвергались деформационному воздействию в шаровой планетарной мельнице АГО-2С мощностью 28,1 Вт в среде инертного газа ($P_{Ar} = 0,1$ МПа). Структурные изменения, происходящие в результате механоактивации (МА) фуллеритов С60/70 и графита, исследовались методами рентгеновской дифракции, ИК-, УФ-спектроскопии и растровой электронной микроскопии.

Механический размол в шаровой планетарной мельнице приводит к разупорядочению кристаллической структуры исходных углеродных материалов. Установлено, что деформационная стабильность графита существенно ниже фуллерита. Амorfизация графита наблюдается уже после 1 ч МА, фуллерита – 16ч. Время полного разрушения фуллерита соответствует 28 часам. Разупорядочение кристаллической структуры фуллеритов сопровождается разрушением молекул фуллеренов.

Наблюдаемые отличия деформационной нестабильности графита и фуллерита, вероятно, связаны с существенными различиями в прочности связей между атомами углерода в молекуле фуллерена (прочные ковалентные связи С-С и С=C) и между плоскостями графитовых слоев (слабые Ван-дер-Ваальсовы С-С связи).

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума УрО РАН (проект № 12-Т-2-1015).

Эффективно люминесцирующее состояние внутри запрещенной зоны в квантовых точках PbS

А.П. Литвин¹, П.С. Парфенов¹, Е.В. Ушакова¹, А.В. Баранов¹.

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

Исследованы оптические свойства полупроводниковых квантовых точек (КТ) сульфида свинца (PbS). КТ PbS, диаметром 2.7–8.5 нм и люминесцирующие в области 0.8–2 мкм, синтезированы методом горячей инъекции, образцы приготовлены в виде растворов в тетрахлорметане. Измерения спектров оптического поглощения и люминесценции обнаруживают необычную размерную зависимость Стоксового сдвига: незначительный Стоксов сдвиг 4–5 мэВ для КТ наибольшего диаметра и сдвиг вплоть до 300 мэВ для наименьших КТ.

Аномальная размерная зависимость наблюдается для времен жизни люминесценции, измеренных для КТ, люминесцирующих в диапазоне 0.8–1.7 мкм. Увеличение размера КТ и, соответственно, длины волны соответствующего энергетического перехода, приводит к уменьшению времени жизни люминесценции с 2.5 до 0.25 мкс.

Анализ результатов показал, что необычные оптические свойства КТ PbS могут быть объяснены с помощью модели энергетического уровня внутри запрещенной зоны. Положение этого уровня зависит от размера КТ. Излучательная рекомбинация возможна как через это энергетическое состояние, так и через фундаментальный переход. При этом, при энергетическом зазоре между двумя этими уровнями, сопоставимом с kT , возможны безызлучательные переходы как с понижением, так и повышением энергии.

Ферромагнитный резонанс в гелимагнетике $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$

Ф.Б. Мушенюк

¹ *Институт Проблем Химической Физики РАН, Черноголовка, Москва*

Методом ферромагнитного резонанса исследованы высокочастотные спиновые возбуждения в хиральном гелимагнетике $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$. В геликоидальной фазе этого соединения обнаружены две линии ФМР с различной температурной зависимостью резонансного поля H_{res} (рис. 1).

Линия I соответствует однородному ферромагнитному резонансу ($q = 0$) в геликоидальной фазе. Температурная зависимость резонансного поля $H_{\text{res},I}$ качественно хорошо согласуется с температурной зависимостью статической одноосной анизотропии K_1 . В тоже время, обнаружено различие статической и динамической констант магнитной анизотропии на порядок величины. Такое различие может быть обусловлено анизотропными вкладами антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мория и неоднородного обменного взаимодействия в свободную энергию гелимагнетика.

Линия II в спектрах ФМР соответствует возбуждению Голдстоуновской моды ($q = \pm Q$, где Q – вектор модуляции магнитной структуры). Конечное значение энергии этой моды индуцировано магнитокристаллической анизотропией шестого порядка K_6 в базальной плоскости ab кристаллов $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$. Уменьшение анизотропии K_6 с ростом температуры приводит к убыванию резонансного поля $H_{\text{res},II}$.

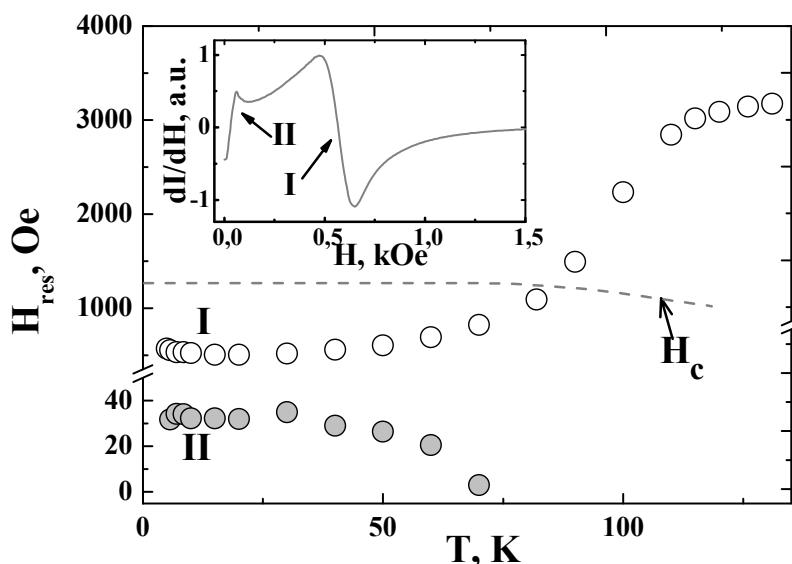


Рис. 1. Температурные зависимости резонансных полей линий I и II монокристалла $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$, $H \perp c$ ($\perp Q$). Пунктирной линией показано критическое поле перехода в ферромагнитную фазу. На врезке показан спектр ФМР при $T = 5$ K.

Влияние исходного состава медно-бериллиевого сплава на величину магнитоэластического эффекта при старении в постоянном магнитном поле

Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев, Ю.И. Румянцева

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Из литературных данных [1] по старению бериллиевой бронзы БрБ-2 и ранее проведенных авторами [2] исследований известно, что наличие легирующей примеси Ni в сплавах влияет на концентрацию насыщения B_e , время ее релаксации в остаточной матрице и величину магнитоэластического эффекта (МПЭ). В данной работе выполнено комплексное экспериментальное исследование влияния добавки Ni 0.35 вес. % на МПЭ в Cu-Be сплаве, содержащем 1.0 и 2.5 вес. % Be, после старения в постоянном магнитном поле (ПМП) и без него. Режимы закалки и старения сплава выбирали на основе ранее проведенных исследований [3].

Анализ полученных экспериментальных данных показал, что наложение ПМП всегда приводит к увеличению микротвердости до ~34 %, т.е. наблюдается «отрицательный» МПЭ. Причем, величина МПЭ увеличивается с увеличением концентрации Be. Наличие добавки Ni в сплаве приводит к увеличению микротвердости до ~43 % по сравнению со сплавом без Ni, кроме этого присутствие Ni изменяет кинетику процесса старения. Кроме этого, величина микротвердости в сплавах с Ni в более чем 2,5 раза больше по сравнению со сплавом без него. Рентгеновский анализ показал, что наличие примеси Ni в сплаве приводит к существенным изменениям параметров тонкой структуры: средний размер блоков когерентного рассеяния уменьшается в ~3 раза, величина относительной микродеформации и плотность дислокаций увеличиваются в ~2,5 и 10 раз, соответственно. Полученные эффекты в исследуемых сплавах, возможно, связаны с тем, что Ni, согласно [1] замедляет фазовые превращения в Cu-Be сплавах, задерживает рекристаллизационные процессы в Cu-Be сплавах и способствует получению более мелкого рекристаллизационного зерна. Для выяснения механизмов формирования МПЭ в данной работе перспективно получение информации о магнитных корреляциях в рассматриваемых сплавах, связанных с комплексо- и фазообразованием в области их магниточувствительности, получаемой методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов, магнитных измерений и моделирования молекулярной динамики.

1. Б.А. Колачев, Р.М. Габидуллин, Ю.В. Пигузов. Технология термической обработки цветных металлов и сплавов (Москва, Металлургия, 1980).
2. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев. Вестник СамГУ **78**, 145 (2010).
3. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. ФХОМ **3**, 18 (2003).

Анализ микроструктуры мультиферроиков состава $\text{Bi}_{1-x}\text{Re}_x\text{FeO}_3$ (Re – Tb, Dy, Ho, Er, Yb, Tm, Lu)

А.А. Павелко, В.А. Алешин, Л.А. Шилкина

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

Мультиферроики, представляющие собой обширный класс материалов, сочетающих в себе сегнетоэлектрические, ферромагнитные и сегнетоэластические свойства, в настоящее время подробно изучаются в связи с потенциальной возможностью их применения в новых устройствах, основанных на взаимном контроле магнитного и электрического полей [1]. Феррит висмута BiFeO_3 и его твердые растворы (ТР) являются удобными объектами для создания магнитоэлектрических материалов благодаря высоким значениям электрического ($T_c \sim 1083$ К) и магнитного ($T_N \sim 643$ К), упорядочения [2]. В качестве компонентов таких соединений часто выступают редкоземельные элементы (РЗЭ), введение которых позволяет стабилизировать структуру BiFeO_3 и оптимизировать его свойства. В настоящей работе ставится цель выявить закономерности формирования фазовой и поликристаллической (зеренной) структур образцов BiFeO_3 с некоторыми РЗЭ и их корреляцию с макроскопическими свойствами объектов.

Объектами исследования являлись ТР бинарных систем состава $\text{Bi}_{1-x}\text{Re}_x\text{FeO}_3$ (где Re = Tb, Dy, Ho, Er, Yb, Tm, Lu, $x = 0.05 \div 0.20$, $\Delta x = 0.05$). Образцы получены по обычной керамической технологии, включающей двухстадийный синтез с последующим спеканием без приложения давления [3].

1. А.К. Звездин, К.А. Звездин, Природа. 9, 9 (2001).
2. Г.А. Смоленский, И.Е. Чупис, Успехи физических наук. 137, 415-448 (1982).
3. И.А. Вербенко, Сб-к матер. VII Межд. науч.-технич. конф. «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения» (INTERMATIC – 2009). Москва. МИРЭА: ЦНИИ «Электроника». 126-131 (2009).

Diluted Magnetic Semiconductors TiO₂:Co, TiO₂:V and TiO₂:Mn : relationship of defects, magnetization and MO properties

A. Smekhova^{1,3}, R. Baulin¹, F. Pankratyev¹, A. Semisalova¹, A. Novikov¹,
Yu. Mikhaylovskiy¹, A.F. Orlov², M. Butterling³, O. Yildirim³, K. Potzger³

¹ Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

² Institute of Rare Metal Industry "Giredmet", Moscow, Russia

³ Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden, Germany

A continues search for systems that could be considered as Diluted Magnetic Semiconductors (DMS) has been launched by the theoretical prediction of Dietl *et al* in 2000 [1]. An initial idea was to use these systems for spintronics applications where the spin of carriers could be used as well as their charge. For this purpose a lot of compounds have been already studied [see 2-3, and references therein].

In our study a new series of DMS on the basis of titanium dioxide thin films (0.3÷0.5µm) doped by 3d impurities with one unpaired spin (Co, V and Mn) has been synthesized by magnetron sputtering technique in argon-oxygen atmosphere from ceramic targets.

The hysteresis loops measured by VSM magnetometry have shown the presence of expected ferromagnetic order at room temperature for TiO₂:Co and TiO₂:V in spite of a tiny level of magnetization in saturation. The magneto-optical (MO) spectra of transversal Kerr effect have proved the ferromagnetic behavior only for our TiO₂:Co samples and clarified the presence of Co clusters for the sample that was annealed in vacuum after the sputtering. Transport measurements revealed the n-type of carriers either for TiO₂:Co or TiO₂:V samples. Positron Annihilation Spectroscopy (PAS) was used to check the point and open volume defects by depth-resolved Doppler broadening spectroscopy at the slow-positron-beam SPONSOR [4] with positron energies 27 eV...36 keV. The standard XRD analysis has been used for structural characterization.

The magnetic moment values per impurity atom for all samples that reveal magnetization have been calculated and compared with values published in the literature by other groups. The possible difference in exchange mechanisms in TiO₂:Co and TiO₂:V systems is under discussion.

This work is supported in part by the Helmholtz-Russia Joint Research Group HRJRG-314 and the Russian Foundation for Basic Research, RFBR #12-02-91321-SIG_a

1. Dietl T, Ohno H, Matsukura F *et al.*, Science **287**, 1019 (2000)
2. K.Potzger, NIM B, **272**,78 (2012)
3. T. C. Kaspar, A. Ney *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 035322 (2012)
4. W. Anwand, H.-R. Kissener, G. Brauer, *Acta Phys. Polonica A* **88**, 7 (1995)

Микроструктурный анализ и газочувствительные свойства нанокомпозитных слоев на основе диоксида олова, полученных золь-гель методом

А.А. Пономарева

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет “ЛЭТИ”,
Санкт-Петербург, Россия*

Многие современные разработки основываются на использовании иерархических микронных и наноразмерных пористых материалов, например:

- фотоэлектрохимические ячейки Гретцеля,
- твердооксидные (твёрдоокисные) топливные элементы,
- газовые датчики нового поколения и т.д.

Композитные системы на основе диоксида олова включающие в себя диоксид кремния в разных концентрациях являются перспективным материалом для создания с помощью золь-гель технологии пленочных покрытий с иерархической структурой пор для применения в качестве активного слоя в газочувствительных датчиках.

Газочувствительность образцов измерялась при различных температурах и концентрациях различных аналитов (O_2 , H_2 , C_2H_5OH). Образцы также были исследованы с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) NTEGRA Thermo (NT-MDT, Зеленоград, Россия).

АСМ-изображения показали наличие трехмерной структуры с порами микронных размеров у образцов с 10% содержанием диоксида олова, а также наличие иерархически сформированных круглых пор различного диаметра у образцов с 20% содержанием диоксида олова и практически полное отсутствие пор у образцов без диоксида кремния.

Методами рентгеновского анализа установлено, что мольные соотношения диоксидов олова и кремния в отожженных слоях соответствуют мольным соотношениям материалов в золе. А также продемонстрировано, что пленочные покрытия представляют собой нанокомпозитные слои, состоящие из нанокристаллитов SnO_2 размером ~ 5 нм и рентгеноаморфного SiO_2 . По данным измерения фотолюминесценции и литературного анализа была построена энергетическая зонная диаграмма для кристаллических включений диоксида олова.

Показано, что микроструктура поверхности и объема пленок напрямую влияет на газочувствительные свойства пленок. Также была исследована долгосрочная стабильность изготовленных сенсорных структур. Показано, что нанокомпозиты соответствуют промышленной спецификации по уровню дрейфа и по долговременной стабильности газовых сенсоров.

Отрицательный коэффициент теплового расширения ВТСП-купратов при охлаждении

С.В. Пряничников¹, С.Г. Титова¹

¹ *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

При изготовлении изделий и ВТСП-материалов (как I, так и II поколений) важно, чтобы коэффициент теплового расширения (КТР) сверхпроводящего материала был близок к КТР металлических оболочек. Известно, однако, что высокотемпературные купратные сверхпроводники демонстрируют аномальное поведение в интервале температур $\sim 140 - 280$ К. Это выражается в том, что температурные зависимости параметров элементарной решётки и/или коэффициентов теплового расширения (КТР) немонотонны, а величины КТР – отрицательны [1]. Аномальное поведение может являться причиной растрескивания сверхпроводящих устройств и требует изучения

В данной работе для ВТСП-систем $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, $\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$, $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ исследованы температурные зависимости параметров элементарной ячейки для различных типов и концентрации носителей заряда. Показано, что в интервале температур ~ 170 К \div ~ 240 К минимальные значения коэффициентов теплового расширения, вплоть до отрицательных величин, имеют наиболее близкие к оптимально допированному состоянию образцы.

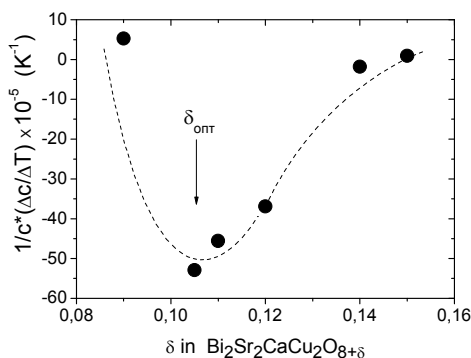


Рис. 1. Коэффициенты теплового расширения вдоль *c*-оси для образцов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ в зависимости от δ в интервале температур 150 – 230 К [2].

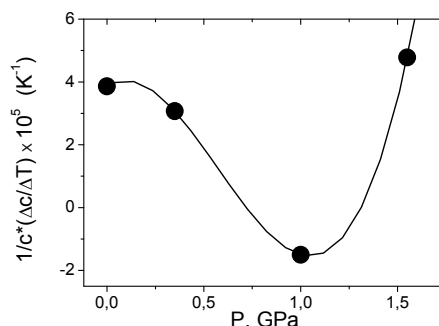


Рис. 2. Коэффициент теплового расширения вдоль *c*-оси, рассчитанный в интервале температур 170-240 К для $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$ в зависимости от приложенного внешнего давления [3].

1. Svetlana G. Titova, John T.S. Irvine “Superconductivity Research Developments. 2008, ISBN: 1-60021-848-2, Ed. by James R. Tobin, 240 p.; Chapter 4 - Perspectives of Superconducting Temperature Increase in HTSC Copper Oxides; P. 93.
2. С.В. Пряничников, С.Г. Титова и др., ЖЭТФ, т. 134, вып. 1(7), с. 1-6 (2008).
3. Titova S., Pryanichnikov S. et al, Journal of Physics: Conference Series, V. 150, P. 052269 (2009).

Концентрационные изменения структур в системе твердых растворов на основе манганита иттрия

А.Г. Разумная, А.В. Назаренко, А.Г. Рудская, М.Ф. Куприянов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В последние годы твердые растворы системы $Y_{1-x}Ca_xMnO_3$ изучены в ряде работ, детальная информация об их структурах до сих пор не получена. Главная особенность этих твердых растворов состоит в том, что с увеличением концентрации ионов Са в системе наблюдается реконструктивное изменение структуры гексагонального типа, характерной для $YMnO_3$ в орторомбическую перовскитовую при комнатной температуре.

В данной работе целью являлось изучение закономерностей концентрационных изменений структур в твердых растворах $Y_{1-x}Ca_xMnO_3$ для определения характера образующихся кристаллических фаз при разных концентрациях компонентов твердых растворов, областей их существования и закономерностей изменений длин межатомных связей.

Установлено, что в составах системы твердых растворов $Y_{1-x}Ca_xMnO_3$ при комнатной температуре в окрестности $x = 0.15$ проходит концентрационная граница между гексагональными фазами $R\bar{6}_3cm$ и $R\bar{6}_3/mmc$. В области концентраций $0.17 \leq x \leq 0.25$ происходит реконструктивный переход от гексагональной фазы $R\bar{6}_3/mmc$ к орторомбической перовскитовой фазе $Rnma$.

Сравнительный анализ длин межатомных связей l в кислородных полиэдрах гексагональной и перовскитовой структур показывает, что l_{Mn-O} в них близки при приблизительно одинаковой анизотропии в пределах полиэдров. Таким образом, реконструкция структур практически не затрагивает межатомные расстояния внутри кислородных полиэдров, а изменяются координационные числа: бипирамиды превращаются в октаэдры, а восьмивершинники ионов типа A – в 12-ти вершинные кубоктаэдры с соответствующим уплотнением структуры при реконструктивном преобразовании гексагональной структуры в перовскитовую.

В докладе представлены результаты предварительных измерений магнитных свойств твердых растворов $Y_{1-x}Ca_xMnO_3$. Обнаружены эффекты магнитного упорядочения при температурах порядка 50 К.

Появление магнитной необратимости в окрестности перехода изолятор-металл в кластерной подсистеме, образующейся в результате фазового разделения выше T_C , в монокристаллическом $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$

В.А. Рыжов¹, А.В. Лазута¹, П.Л. Молканов¹, В.П. Хавронин¹, О.П. Смирнов¹, Я.М. Муковский²

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

² *Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия*

Образование ферромагнитных (Φ) кластеров в дырочно-допированных манганитах ниже некоторой температуры T^* ($> T_C$) является формой магнитно-электронного фазового разделения (ΦP), возникающего в системах с сильными электронными корреляциями. Природа этого состояния остается нерешенной проблемой [1]. Исследования полевых и T -зависимостей второй гармоники намагниченности $M_2(H, T)$ продольного нелинейного отклика на слабое ac поле показали образование Φ кластеров, проявляющих сильные нелинейные магнитные свойства в слабых полях, в $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганите при $T^* \approx 252\text{K} > T_C$. Их концентрация быстро росла с понижением T , как это наблюдалось на $\text{Nd}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ $x=0.23, 0.25$ манганитах [2,3], на что указывал рост амплитуды их $M_2(H)$ -сигнала без изменения его формы. Однако, при дальнейшем охлаждении, в T -области 217-190К вблизи перехода изолятор-металл (И-М) $T_{\text{ИМ}} \approx 201\text{K} > T_C \approx 186\text{K}$, наблюдалось необычное явление «необратимости». Оно заключалось в нарушении обычного закона обращения магнитного момента [$\text{Re}(\text{Im})M_2(H) = -\text{Re}(\text{Im})M_2(-H)$ для M_2 -отклика] при инверсии знака постоянного поля. При приближении к T_C эта особенность становилась почти незаметной и затем вновь проявлялась ниже T_C в области обратного М-И перехода ($182\text{K} \geq T \geq 99\text{K}$). Нейтронная дифракция не показала аномалий в решеточных параметрах и Ян-Теллеровских искажениях в области 100-300К. Изменялось лишь отношение углов Mn-O1/O2-Mn , T -зависимости которых пересекали друг друга вследствие вращения MnO_6 октаэдров вокруг псевдокубического направления [111]. Такая трансформация наблюдалась ранее в NdBa $x=0.23, 0.25$ манганитах [2,3] без появления необратимости. Эффекты «необратимости» наблюдались ранее в узкозонных $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ манганитах при низких T в метамагнитных переходах из АФ в Φ состояние в больших магнитных полях [7]. В нашем случае появление необратимости было отнесено к изменению магнитной кинетики Φ кластеров, связанному с увеличением их размеров вследствие коалесценции при приближении к $T_{\text{ИМ}}$. Ниже $T_{\text{ИМ}}$, вблизи T_C возраставший вклад в M_2 отклик от критической матрицы маскировал необычный кластерный сигнал. Он снова проявлялся лишь ниже T_C , когда начинался процесс доменообразования в матрице, приводящий, как обычно, к уменьшению отклика матрицы на слабое поле.

1. E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo, Phys. Rep. **344**, 1 (2001).
2. В.А. Рыжов, А.В. Лазута, И.Д. Лузянин и др., ЖЭТФ **121**, 678 (2002).
3. V.A. Ryzhov, A.V. Lazuta, O.P. Smirnov et al., Phys. Rev. B **72**, 124427 (2005).
4. T. Elovaara, H. Huhtinen, et al., J.Phys.: Condens. Matter **24**, 216002 (2012).

Влияние простого и комбинированного модифицирования на формирование электрофизических свойств поликристаллических материалов на основе ниобатов щелочных металлов

Х.А. Садыков

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

подавляющая часть промышленных сегнетопъезокерамик представляет собой токсичные Pb-содержащие твёрдые растворы (ТР). В связи с актуализацией проблемы экологической безопасности необходимой становится разработка альтернативных материалов. Одними из наиболее перспективных кандидатов на роль матрицы таких объектов являются ТР на основе ниобатов щелочных металлов (НЦМ), которые обладают выраженными сегнетоэлектрическими свойствами, широким изоморфизмом, достаточно высокими температурами Кюри. Однако известные на сегодня керамики на основе НЦМ уступают Pb-содержащим материалам по ряду технически важных показателей. В связи с вышесказанным, целью настоящей работы является установление закономерностей формирования высоких значений механической добротности (Q_m), пьезочувствительности (g_{33}), анизотропии пьезоэлектрических коэффициентов ($d_{33}/|d_{31}|$), низкой электропроводности ($\sim \text{tg}\sigma$ – тангенс угла диэлектрических потерь) и повышенной стабильности электрофизических характеристик при сохранении достаточной пьезоэлектрической активности (K_p – коэффициент электромеханической связи планарной моды колебаний) материалах на основе НЦМ при их простом и комбинированном модифицировании.

В ходе проведенного исследования установлено, что рост Q_m и g_{33} , а также снижение $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$, $\text{tg}\sigma$ и электропроводности в модифицированных керамиках на основе системы $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$ обусловлены частичным встраиванием катионов-модификаторов Cu^{2+} и Ni^{2+} в А-, а Mn^{4+} – в В-подрешётку структуры перовскита с образованием анионноизбыточных и анионнодефицитных ТР повышенной сегнетожесткости. Увеличение пьезоанизотропии в модифицированных ТР связано с формированием текстур межкристаллитных прослоек, тормозящих движение их границ вдоль определённых направлений.

Путём модифицирования получены сегнетопъезокерамические материалы, обладающие высокими $Q_m > 700$, $g_{33} \sim 40$ мВ·м/Н, $d_{33}/|d_{31}| > 5$ и низкой электропроводностью, при сохранении достаточной пьезоэлектрической активности, $K_p \sim 0.2$. Выявлены наиболее перспективные составы для применения в ряде областей народного хозяйства (прецизионная акселерометрия в системах безопасности авиакосмической техники, неразрушающая дефектоскопия конструкционных материалов в металлургии, ультразвуковой каротаж скважин при нефтедобыче и строительстве).

¹¹¹Cd-PAC Study of Pressure Effect on the Yb valence in the Cubic Phase YbGe_{2.85}

D.A. Salamatin^{1,6}, A.V. Tsvyashchenko^{1,3}, A. Velichkov², A.V. Salamatin²,
L.N. Fomicheva¹, G.K. Ryasniy³, A.V. Nikolaev³, M. Budzynski⁴, R.A. Sadykov^{1,5},
A.V. Spasski³

¹Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS, Troitsk, Russia

²Joint Institute for Nuclear Research, Moscow, Russia

³Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

⁴Institute of Physics, M. Curie-Sklodowska University, Lublin, Poland

⁵Institute for Nuclear Research of RAS, Troitsk, Russia

⁶Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Dolgoprudny, Russia

The method of perturbed angular $\gamma\gamma$ -correlation (PAC) was first investigated by electric quadrupole interaction arising at the probe nuclei ¹¹¹Cd in the new cubic phases YbGe_{2.85}, TbGe_{2.85} and DyGe_{2.85} (type AuCu₃), synthesized at 8 GPa. The PAC anisotropy time spectra were characterized by a single quadrupole frequency with $\eta = 0$, as the Ge site is 4/mmm symmetry. At normal pressure for YbGe_{2.85} the PAC frequencies $\nu_Q = eQV_{zz}/h = 23.8$, for TbGe_{2.85} $\nu_Q = 37.5$ and DyGe_{2.85} $\nu_Q = 38.0$ MHz. At increase pressure up to 8 GPa the time spectra vs. a external pressure were measured for compound YbGe_{2.85} and the values of quadrupole frequency were defined. From values of quadrupole frequency the pressure dependence of Yb valence was determined. In this range of the pressure the Yb valence varied from 2.46 to 2.89.

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No 11-02-00029).

Фазовое разделение сложных манганитов при половинном легировании на примере организации $\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$

Г. Саранин¹, А. Курбаков^{1,2}, В.А. Рыжов², В.В. Рунов², С. Martin³, А. Maignan³

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

³ Universite de Caen, Caen, France

Ранее, в итоге комплексных исследований соединений $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ были получены результаты, показывающие, что заменой Sm на Pr и обратно можно решительно изменить магнито-транспортные свойства манганитов. Методами порошковой нейтронной дифракции высокого разрешения и измерения деполяризации нейтронов, температурных зависимостей намагниченности и ее второй гармоники, а также электросопротивления проведено исследование фазового разделения и микроскопической природы магнитосопротивления в сложных манганитах при половинном легировании на примере $^{154}\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$. Обнаружено существование структурного фазового перехода при 170К от высокотемпературной ромбической $Pbnt$ фазы к смеси двух фаз: ромбической $Pbnt$ и моноклинной $P2_1/m$ с теми же самыми позициями атомов в элементарной ячейке, но с разными параметрами решетки. Элементарная ячейка обеих фаз характеризуется соотношением $c/\sqrt{2} < b < a$ (O' -структура) для всех температур. Анализ магнитного вклада в экспериментальные нейтронограммы при низких температурах указывает, что основное магнитное состояние исследуемого соединения является фазоразделенным и представляет собой смесь трех магнитных фаз, образующихся при разных температурах: ферромагнитной ($T_C \sim 300\text{K}$), антиферромагнитной А-типа ($T_N^A \approx 170\text{K}$) и антиферромагнитной зарядоупорядоченной псевдо-СЕ-типа ($T_N^{CE} \approx 120\text{K}$), возникающих из-за сильной конкуренции между механизмами локализации и делокализации зарядов. F упорядочение формируется в районе комнатной температуры. Оно соответствует высокотемпературной слабдеформированной ромбической фазе, единственной, существующей при температурах начала F упорядочения. Оба антиферромагнитных состояния соответствуют одной моноклинной кристаллической структуре, сильно сжатой по оси c . В итоге описана микроскопической природы магнитосопротивления, которое проявляется в понижении величины ρ на несколько порядков при приложении магнитного поля в 7 Тл.

This work was supported by RFBR grant No. 12-02-00073

Особенности оже-спектров оксидов элементов

Т.Н. Сметюхова¹, Д.А. Подгорный¹

¹ Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия

При изучении наноразмерных объектов важным вопросом является определение их элементного и количественного составов с высоким локальным разрешением, а также химического состояния. Одним из методов позволяющих решить данную проблему может быть метод электронной оже-спектроскопии (ЭОС).

На примере оксидов кремния, алюминия, титана и тантала показана возможность определение химического состояния и стехиометрии соединений с высоким локальным разрешением (латеральное 15-30 нм, по глубине 1-3 нм). В работе изучено изменение формы и положения оже-пиков элементов в оксидах и чистых элементах путём их сравнения в интегральных и дифференциальных формах оже-спектров. Отмечены следующие особенности:

- Для SiO_2 в областях низких и высоких энергий для пиков кремния характерен значительный сдвиг положения максимума оже-пика в сторону низких энергий относительно чистого элемента. При этом происходит изменение структуры пиков.

- Для Al_2O_3 характерно значительное изменение формы пиков оже-спектров алюминия относительно чистого металла из-за перераспределения интенсивностей. В области низких энергий происходит значительное смещение положения максимума пика окисленного состояния по сравнению с неокисленным в сторону низких энергий.

- Для TiO_2 характерно незначительное смещение положения пиков по отношению к пикам чистого металла и значительное изменение их формы из-за перераспределения интенсивностей между пиками.

- Для Ta_2O_5 видимых изменений в структуре и интенсивности пиков не наблюдается.

- Оже-спектр кислорода состоит из двух пиков, независимо от соединения. Значительное смещение пика кислорода в сторону низких энергий наблюдается только в SiO_2 . Данный сдвиг не обусловлен зарядовым состоянием образца.

С помощью эталонных образцов SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 и Ta_2O_5 были определены коэффициенты относительной элементной чувствительности (КОЭЧ) элементов в оксидах для дифференциальной формы оже-спектров, так как стандартные КОЭЧ давали значительное отклонение по составу. Новые коэффициенты позволяют проводить количественный анализ с большей точностью, по сравнению с применением стандартных КОЭЧ, так как в некоторых случаях уменьшают системную ошибку.

Local magnetic moments, macroscopic magnetization and crystal structure of new magnetic superconductor EuRh_4B_4

A. Smekhova^{1,3,4}, L.N. Fomicheva², A.V. Tsvyashchenko², V.A. Sidorov²,
A. Rogalev³, O.Yildirim⁴, Ya.Zubavichus⁵

¹ M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

² L.F.Vereshchagin Institute for High Pressure Physics RAS, Troitsk, Russia

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁴ Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden, Germany

⁵ National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

The interest to new materials where the superconductivity coexists with ferro- or ferri- magnetic long range order was initiated by two famous papers published a rather long time ago [1,2]. Since then, a number of different systems that satisfy these terms have been already discovered [3,4,5]. Among them extremely interesting and exuded systems are compounds on the basis of CuO [6] or LaO based systems containing iron [7].

Recently [8] the new ternary boride EuRh_4B_4 was synthesized by an unconventional method, i.e. at high pressure (8GPa) and temperature (up to 1600°C), where the ferromagnetic and superconducting phases have been found below $T_c = 83\text{K}$ and $T_{sc} = 5.8\text{K}$ respectively. Element-selective XANES and XMCD spectra recorded at the Eu $L_{2,3}$ absorption edges clearly demonstrate the presence of “non-magnetic” Eu^{3+} ions as well as “magnetic” Eu^{2+} with a strong local magnetic polarization of $5d$ states above the superconducting phase (SC) transition. Nevertheless, the results of direct macroscopic magnetization measurements below SC temperature have not yet been reported.

In the present work we proved the existence of ferromagnetic ordering below the SC transition temperature T_{sc} and the adjunction of a tiny ferromagnetic contribution to a paramagnetic signal for temperatures below T_c but above SC transition by means of SQUID magnetometry. For temperatures above T_c only the paramagnetic signal has been found.

Our additional studies by temperature-dependent XAFS established no changes in the $\text{Eu}^{2+}/\text{Eu}^{3+}$ ratio (as evidenced by Eu $L_{2,3}$ - edge XANES) for temperatures down to 7K. Small variations in the Eu-Eu, Eu-Rh and Rh-Rh distances as a function of temperature are discussed.

This work is supported in part by the Helmholtz-Russia Joint Research Group HRJRG-314 and the Russian Foundation for Basic Research, RFBR #12-02-91321-SIG_a

- 1 V.L. Ginzburg, Sov. Phys. JETP **4**, 153 (1957)
- 2 P.W. Anderson, H. Suhl, Phys. Rev. **116**, 898 (1959)
- 3 W.A.Fertig, D.C.Johnson, L.E.DeLong, *et al*, Phys.Rev.Lett. **38**, 387 (1977)
- 4 S.S. Saxena *et al*, Nature (London) **406**, 587 (2000)
- 5 D. Aoki, A. Huxley *et al*, Nature (London) **413**, 613 (2001)
- 6 J. G. Bednorz, K. A. Z. Muller, Phys. B **64**, 189 (1986)
- 7 H. Luetkens, H.-H. Klauss, M. Kraken *et al.*, Nature Materials **8**, 305 (2009)
- 8 A. Smekhova, L.N. Fomicheva *et al.*, Solid State Phenomena **190**, 421 (2012)

Влияние алкильных заместителей в полиметиновой цепи на образование стереоизомеров и агрегатов в органических тонких пленках

А.А. Старовойтов, Е.Н. Калитеевская, В.П. Крутякова, Т.К. Разумова

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Органические тонкие пленки многоатомных соединений широко используются в системах записи информации, перспективно их применение и для создания нового типа источников вынужденного излучения – спайзеров, и других элементов оптоэлектроники.

Тонкие пленки полиметиновых соединений с длинной цепью сопряжения на стеклянных подложках содержат несколько типов молекулярных наноконпонентов, отличающихся спектральными параметрами. Число и тип конпонентов зависит от толщины слоя. В тонких слоях присутствуют только мономолекулярные конпоненты – all-trans-изомеры (преимущественная конфигурация молекул в этанольном растворе красителя) и cis-изомеры, возникающие из all-trans-формы при поворотах вокруг связей полиметиновой цепи. Дальнейшее увеличение поверхностной концентрации молекул приводит к образованию димеров и J-агрегатов. Спектральные параметры разных типов конпонентов. Соотношение между поверхностными концентрациями стереоизомеров определяется как толщиной слоя, так и химическим строением молекулы.

Для выяснения стереоструктуры наноконпонентов слоя исследованы молекулярные слои в серии из 4 полиметиновых красителей – DTDCI и его производных, отличающихся алкильными заместителями в разных положениях цепи сопряжения. Сопоставлены спектры поглощения растворов красителей и слоев разной толщины.

Показано, что в слоях толщиной менее 1 монослоя присутствуют до 4 мономерных конпонентов. Спектральные сдвиги длинноволновых синглетных полос изомеров разного типа относительно all-trans-изомера лежат в диапазоне 1600-6500 обратных сантиметров и зависят от типа изомера. При этом отличия между величинами сдвига для одинаковых конпонентов в ряду исследованных соединений существенно меньше, чем отличие этих величин между разными конпонентами одного слоя.

Построены все возможные стереоизомеры исследованных соединений, возникающих из all-trans-формы при поворотах фрагментов молекулы вокруг разных углеродных связей полиметиновой цепи. Показано, что существует корреляция между интенсивностью полос поглощения различных мономерных конпонентов в тонкой пленке и пространственными помехами в изомерах этих молекул, позволяющая определить стереостроение получаемых изомеров.

Установлено, что введение заместителей в цепь вызывает резкое падение относительной концентрации димеров, но мало влияет на концентрацию J-агрегатов. Это свидетельствует о том, что J-агрегат в слоях состоит не из димеров, а из мономеров.

Влияние бария на характер фазового перехода в многокомпонентной системе на основе PMN-PT

М.В. Таланов

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

Материалы на основе твердых растворов (ТР) сегнетоэлектриков-релаксоров (СЭР) $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ (PMN) и $\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ (PZN) и классического сегнетоэлектрика PbTiO_3 (PT) представляют значительный интерес для практических применений в сонарах и актюаторах. Составы этих систем, находящиеся вблизи морфотропной фазовой границы, демонстрируют высокие электромеханические свойства [1]. В то же время, стабилизация структуры перовскита в ряде высокоэффективных ТР на основе СЭР (например, PZN) является весьма затруднительной. Одним из способов такой стабилизации является введение в А-подрешетку катионов Ba^{2+} , частично замещающих Pb^{2+} [2], обладающих меньшей по сравнению с Pb^{2+} электроотрицательностью и поляризующим действием. Целью данного исследования явилось установление особенностей влияния модифицирования барием керамик на основе известных СЭР (PMN, PZN, $\text{Pb}(\text{Ni}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$) и PT на характер СЭ фазового перехода (ФП).

Детальное изучение температурных зависимостей действительной ε' и мнимой ε'' частей комплексной диэлектрической проницаемости ε^* , а так же $d\varepsilon'/dT(T)$ -зависимостей модифицированного и немодифицированного образца позволило сделать следующие выводы:

-модифицирование барием приводит к снижению температуры максимума ε' (T_m) почти на 50 град. ($T_m=81^\circ\text{C}$ в модифицированном образце и 130°C в немодифицированном при $f=1\text{кГц}$) и повышению параметра размытия ФП γ с 1,58 до 1,85;

-форма $d\varepsilon'/dT(T)$ -зависимостей модифицированного барием образца отличается более размытым очертанием, что может косвенно свидетельствовать как о размытии ФП первого рода, так и о тенденции к смене рода ФП. В пользу последнего говорит и тот факт, что температурный гистерезис $\varepsilon'(T)$ -зависимости (врезка), характерный для ФП первого рода, при модифицировании барием уменьшается с $\Delta T \approx 12$ град. до $\Delta T \approx 4$ град. вблизи T_m .

В докладе представлено более подробное описание полученных результатов.

1. S.-E. Park, T.R. Shrout, J. Appl. Phys. 82, 1804 (1997).
2. A. Halliyal, U. Kumar, R.E. Newnham, L.E. Cross, J. Am. Ceram. Soc. 70, 119 (1987).

Непрерывный пространственный переход алмаз-графит в детонационном наноалмазе

А.В.Томчук^{1,2}, М.В. Авдеев¹, Л.А. Булавин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

На основе анализа малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) вводится непрерывный пространственный переход от sp^3 (объем) к sp^2 (поверхность) углеродной структуре в детонационном наноалмазе (ДНА) [1]. Вариация контраста в МУРН на ДНА, диспергированных в различные жидкости (вода, диметилсульфоксид), выявляет сдвиг средней плотности длины рассеяния (ПДР) ДНА в сторону меньших значений по сравнению с чистым алмазом (sp^3 состояние углерода), который связан с наличием неалмазной компоненты в структуре ДНА. Углерод на поверхности ДНА характеризуется графитовым sp^2 -состоянием [2], что означает необходимость наличия пространственного перехода от sp^3 к sp^2 -состоянию в объеме частицы. Предполагая структуру "ядро-оболочка" квази-сферических и полидисперсных частиц ДНА, что свидетельствует о резкой границе между алмазным "ядром" и графитовой "оболочкой", и, принимая во внимание экспериментально установленный размер частиц 7 нм, можно получить приемлемые 0.4 нм для толщины графитовой оболочки.

В то же время, на основании отклонения от закона Порода заключается о диффузном характере поверхности частиц [3]. Это предполагает более сложную модуляцию перехода sp^3-sp^2 по сравнению с представлением "ядро-оболочка". В результате сделан вывод о непрерывном (без какой-либо резкой границы) профиле ПДР степенного типа, описывающем диффузную поверхность. Тем не менее, особенность профиля на границе частицы отражает тот факт, что неалмазные состояния сосредоточены в основном близко к поверхности частиц. Найденный переход согласуется с предыдущими данными *ab initio* компьютерного моделирования для нанокристаллов алмаза [4], которые показали, что наиболее стабильные структуры требуют наличия sp^{2+x} связей по всему объему кристаллита.

1. E. Osawa, Pure Appl. Chem. 80, 1365 (2008).
2. M. V. Avdeev, et al., J. Phys. Chem. C 113, 9473 (2009).
3. P. W. Schmidt, J. Appl. Cryst. 24, 414 (1991).
4. A. S. Barnard and M. J. Sternberg, Mater. Chem. 17, 4811 (2007).

Радиофизические свойства пленочных композиционных материалов на основе нанодисперсных частиц ферритов металлов

И.В. Трунина, Г.А. Фролов

Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия

Создание лакокрасочных покрытий, снижающих интенсивность отраженного от образца электромагнитного излучения (ЭМИ), является актуальной задачей при разработке материалов, обеспечивающих экологическую безопасность.

Разработанные на сегодняшний день лакокрасочные материалы не полностью обеспечивают требования к уровню СВЧ-излучения для безопасности человека.

Данная проблема, на наш взгляд, может быть решена только путём создания покрытий, активно взаимодействующих с электромагнитным излучением (ЭМИ), в том числе поглощающих его.

Получение тонкопленочных полимерных покрытий на основе активного угля, в пористой структуре которого синтезированы подвижные магнитоактивные наноразмерные наполнители на основе ферритов различных металлов, позволяющие снижать интенсивность электромагнитного излучения (ЭМИ) является актуальной практической задачей.

Главной особенностью таких материалов является создание условий для формирования нанодисперсной структуры ферритовых частиц в пористой структуре сорбентов в процессе синтеза и сохранения магнитоактивных свойств ферритов металлов при полимеризации композиционного покрытия.

Для получения наполнителей использовались различные органические сорбционные носители и ферриты металлов.

В результате исследований в качестве оптимального сорбента был выбран березовый активный уголь (БАУ). При разработке варьировались такие параметры как: химический состав исходных веществ, количество магнитной фазы в полимере и технологические способы нанесения покрытия на подложку.

Для оценки распределения синтезируемых ферритов металлов в сорбционной матрице полученные образцы были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии. Мессбауэровская спектроскопия магнитоактивных наполнителей на основе феррита кобальта показала, что при взаимодействии с ЭМИ химически синтезированные частицы проявляют суперпарамагнитные свойства. Радиофизические свойства ферритовых полимерных пленок определялись с помощью измерителя коэффициента стоячей волны по напряжению (КСВН) панорамного Р2-61, частота при которой производились измерения, находилась в диапазоне от 10,3 до 11,2 ГГц.

В результате проведенных исследований было установлено, что частицы ферритов металлов являются нанодисперсными, интервал среднего размера частиц составляет 10-15 нанометров. Анализируя полученные результаты, были выделены образцы покрытий с наилучшими радиофизическими показателями.

Обоснование выбора наноразмерного буферного слоя для синтеза пленок $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4-\delta}$ на кремнии

А.В. Труханов¹, С.В. Труханов¹, А.И. Стогний¹

¹ Научно практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

При кристаллизации пленок $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4-\delta}$, полученных методом ионно-лучевого распыления (ИЛР), остро стоит вопрос о минимизации химического взаимодействия материала пленки и подложки (Si) с образованием примесных фаз на интерфейсе пленка-подложка [1]. Формирование примесных фаз (силициды и силикаты катионов, входящих в состав пленки) приводит значительному отклонению от заданной катионной стехиометрией пленки. Что наряду с незначительным дефицитом кислорода в пленке (обусловлено особенностями получения) резко ухудшает магнитные и электрические характеристики полученных пленок по сравнению с керамическим аналогом. Моделирование процессов ИЛР на основе пакета программ SRIM–2008 указывает на нанометровую глубину проникновения ионов мишени в подложку. Таким образом, можно утверждать, что в процессе примесного фазообразования есть 2 составляющие. Первая – температурный вклад, обусловленный термообработкой пленки, вторая – вклад от атомов мишени, проникающих на определенную глубину в подложку в процессе ИЛР. Использование наноразмерного буферного слоя из нестехиометрического оксида титана (TiO_x) должно снизить толщину переходного слоя вот по каким причинам: Во-первых, температура плавления оксида титана (рутила) выше $1800^{\circ}C$ (что позволяет проводить отжиги пленок при требуемых температурах). Во-вторых, TiO_x не вносит вклад в магнитные свойства пленок $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4-\delta}$ на кремнии. В-третьих, является достаточно химически инертным в реакциях с материалом пленки и подложки (взаимодействует только с магнием, окисляя его), что не сказывается на стехиометрии в пленке. В-четвертых, из анализа данных по моделированию можно сделать вывод, что длина проективного пробега адатомов с максимальной энергией в кремнии практически в 2 раза больше, чем длина проективного пробега тех же адатомов в оксиде титана. Т.о. минимальная толщина буферного слоя обусловлена толщиной, при которой пленочные образцы оксида титана характеризуется свойствами объемных образцов ~ 8 нм [2], а также обеспечивали бы эффективное «изолирование» материала пленки и подложки в процессах напыления и отжига пленок. На основании проведенных исследований было определено, что оптимальной толщиной для буферного слоя является толщина 8-10 нм.

1. A.V. Trukhanov et al., J. of Spintr. And Magn. Nanomat.. 1(2), 128 (2012)
2. А.И. Стогний и др., Неорг. мат., 46 (7), 811 (2010)

Структурные особенности, магнитные и резистивные свойства керамики $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Bi}_x\text{Mn}_{1.1}\text{O}_{3\pm\delta}$ ($x = 0 - 0.2$)

*В.А. Турченко¹, А.В. Пащенко², В.П. Пащенко², Ю.Ф. Ревенко²,
В.К. Прокопенко², А.С. Мазур², В.В. Бурховецкий²*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

Одним из актуальных направлений в физике твердого тела является исследование многофункциональных материалов с магниторезистивными (МР) и сегнетомагнитными (СМ) свойствами. К таким металлооксидным материалам относятся редкоземельные (РЗ) манганиты [1], кобальтиты [2] и висмутовые ферриты [3]. В работе были получены и исследованы керамические образцы $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Bi}_x\text{Mn}_{1.1}\text{O}_{3\pm\delta}$ ($x = 0 - 0.2$), синтезированные при 900°C (20 ч) и спеченные при 1000°C (20 ч).

Согласно рентгеноструктурным данным, все исследуемые керамические образцы $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Bi}_x\text{Mn}_{1.1}\text{O}_{3\pm\delta}$ ($x = 0-0.2$) однофазные, содержат ромбоэдрическую (R-3c) перовскитовую структуру, параметры элементарной ячейки увеличиваются с ростом x (Рис.1.).

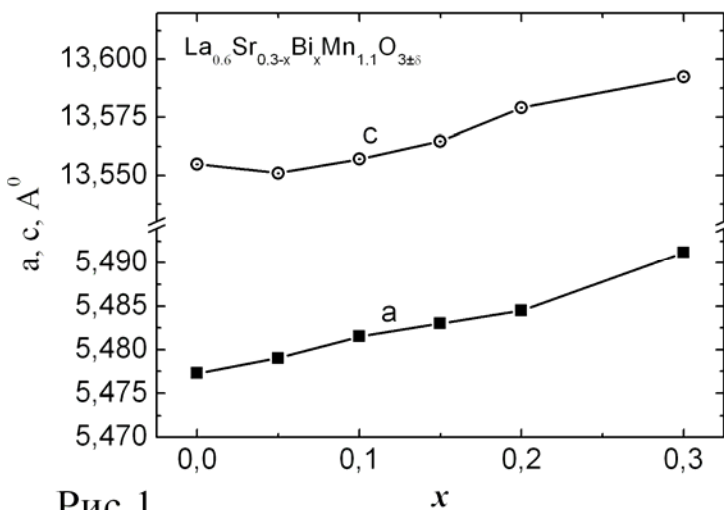


Рис.1.

Температурные зависимости удельного сопротивления ρ и абсолютной дифференциальной магнитной восприимчивости $4\pi N\chi_{ac}$ свидетельствуют о наличии фазовых переходов металл-полупроводник и ферро-парамагнетик, температуры которых T_{ms} и T_c понижаются с ростом x от 360К и 365К ($x = 0$) до 180К и 285К ($x = 0.2$), соответственно.

Из анализа зависимостей $MR(T)$ керамики $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Bi}_x\text{Mn}_{1.1}\text{O}_{3\pm\delta}$ установлено два вида магниторезистивного эффекта. Более высокотемпературный, проявляется вблизи T_{ms} и T_c , увеличивается с x от 2.5% ($x = 0$) до 11.6% ($x = 0.2$) и обусловлен рассеянием носителей заряда на наноструктурных внутрикристаллитных неоднородностях.

1. E. Dagotto, J. Hotta, A. Moreo. Phys. Rep. **344**, 1 (2001).
 2. Y.Q. Lin, X.M. Chen. J. Am. Ceram. Soc. **94**, 782 (2011).
- M.M. Costa, G.F.M. Pires, A.J. Terezo et al. J. Appl. Phys. **110**, 034 107 (2011).

Влияние различных режимов механоактивации на магнитные свойства SmMnO_3

С.А. Упоров, В.Я. Митрофанов, А.Я. Фишман

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Исследованы магнитные свойства исходного и механоактивированных в различных режимах порошков оксидов SmMnO_3 . Механоактивированные образцы были получены с использованием двух планетарных мельниц: высокоэнергичной мельницы AGO-2 с шарами и стаканами из нержавеющей стали и гравитационным эквивалентом (центробежным ускорением) $g=60$ и низкоэнергичной мельницы Pulverizette 4 (FRITSCH), материал шаров и стакана из диоксида циркония и $g=4$.

Магнитные измерения выполнены на вибрационном магнитометре Cryogenic Ltd-9T в диапазоне температур (4- 300)K и магнитных полей от 0 до 2 Тл. Температурные зависимости намагниченности получены в режимах нагрева после предварительного охлаждения в нулевом поле (ZFC) и при охлаждении в поле напряженностью $H=100$ Э (FC). Температуры магнитных фазовых превращений были определены как пики на первых производных ZFC намагниченностей dm/dT . Для исходного манганита самария было установлено наличие фазовых превращений при температурах $T_N = 56\text{K}$ (температура Нееля для марганцевой подрешетки), $T_A = 9\text{K}$ (температура магнитного упорядочения редкоземельной подсистемы [1-2]) и точки компенсации суммарной намагниченности при $T_C = 9.5\text{K}$.

Показано, что влияние механоактивации приводит к подавлению эффекта компенсации намагниченности, по крайней мере, до 4K, редуцированию значений температур Нееля T_N и T_A . Установлено влияние режима механоактивации на магнитные свойства SmMnO_3 . Наиболее существенные изменения магнитных характеристик (намагниченности, коэрцитивной силы, остаточной намагниченности) отмечены для образцов, подвергнутых обработке в мельнице FRITSCH. Дана интерпретация полученным результатам, основанная на изменении нестехиметрии, размерных характеристик и дисперсии случайных деформаций в оксиде при механоактивации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-03-96102p_урал_a) и Программы УРО РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов» Проект 12-П-3-1025.

1. J.-G. Cheng, J.-S. Zhou et al., Physical Review B, 84, (2011) 104415.
2. J.-S. Jung, A. Iyama et al., Physical Review B, 85, (2012) 174414.

Температуропроводность интерметаллических соединений $Al_2PЗМ$ в широком интервале температур

¹*Н.С. Упорова, ²В.А. Быков, ²С.А. Упоров, ²Т.В. Куликова*

¹*Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия*

²*Институт металлургии УрОРАН, Екатеринбург, Россия*

Интерметаллические соединения $Al_2PЗМ$ со структурой кубической фазы Лавеса вызывают научный интерес, благодаря своим неординарным физическим и химическим свойствам. Согласно литературе, в области температур выше комнатной, экспериментальные данные по транспортным свойствам соединений Al - $PЗМ$ противоречивы или вообще отсутствуют. Особенно практически не исследованы такие свойства, как температуро- и теплопроводность.

В данной работе исследована температуропроводность интерметаллических соединений $Al_2PЗМ$ ($PЗМ = La, Ce, Sm, Dy, Ho, Yb$) на экспериментальной установке LFA 447 NETZSCH методом лазерной вспышки в диапазоне температур $20 \div 1100$ °С. Для всех исследованных интерметаллических соединений $Al_2PЗМ$ зафиксированы низкие абсолютные значения температуропроводности (Рис.1а,б). Полученные значения в несколько раз меньше, чем для чистого алюминия (для Al $a = 93,8$ mm^2/s при комнатной температуре) и близки к значениям для чистых $PЗМ$. Зависимости температуропроводности $a(t)$ соединений $Al_2PЗМ$ имеют нелинейный характер. Установлено, что значения a увеличиваются с ростом температуры для всех изученных объектов. Однако для соединений Al_2Yb и Al_2Sm зависимости $a(t)$ обладают кривизной отличной для других исследованных соединений. Данный необычный факт можно объяснить эффектом промежуточной валентности. Полученные результаты обсуждаются в рамках предположения существования направленных связей между атомами алюминия и $PЗМ$. При этом изменение концентрации электронов проводимости сказывается на транспортных свойствах этих объектов.

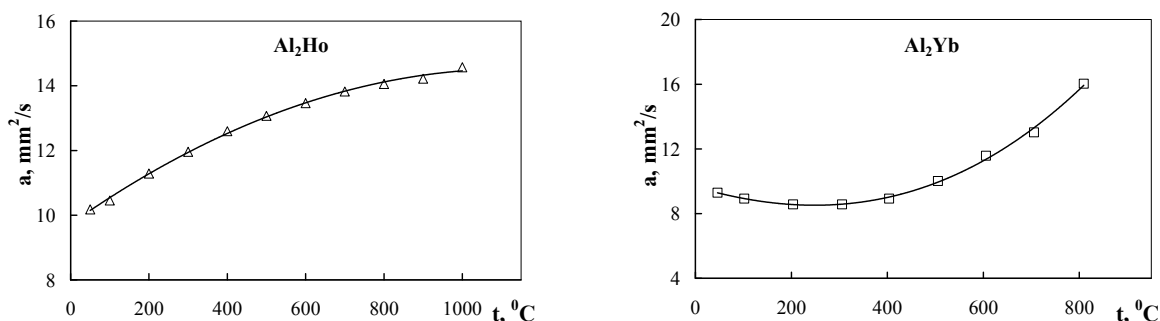


Рис.1. Зависимости $a(t)$ для соединений Al_2Ho и Al_2Yb .

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-03-31399 мол_а

Изучение тонких плёнок CdS:O с отжигом и без отжига с помощью метода спектроскопической эллипсометрии

Хураман Н. Халилова

Институт физики Азербайджанской Национальной Академии Наук, Баку, Азербайджан

Методом спектроскопической эллипсометрии исследованы оптические параметры CdS:O окон для многослойных солнечных элементов. [1,2] Слои CdS:O были изготовлены без отжига в 3%-ной кислородной атмосфере, из с отжигом в 5%-ной кислородной атмосфере. Оба полученных образца были исследованы при комнатной температуре используя спектроскопический эллипсометр с вращающимся компенсатором модели М-2000. С помощью регрессионного анализа полученных эллипсометрических данных построена оптическая модель образцов, найдена их толщина (d) и диэлектрическая проницаемость (действительная и мнимая часть).

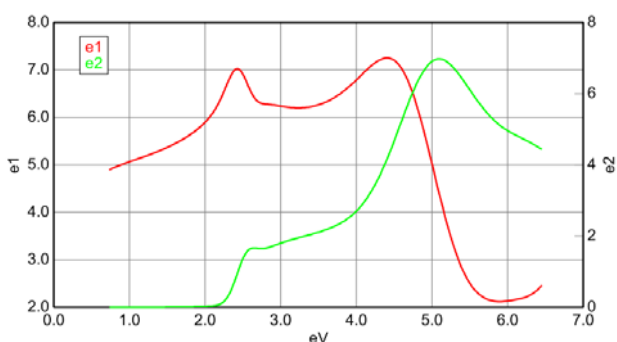


Рис. 1 Диэлектрической функции CdS: O (3%) тонкая пленка, как подготовлена на 250⁰C в течение 15 мин.

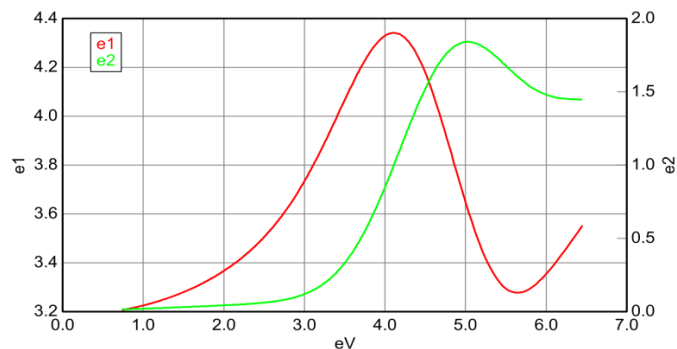


Рис. 2 Диэлектрической функции CdS: O (5%) тонкой пленки отжигали при 250⁰C в течение 15 мин.

1. X. Wu, *Sol. Energy* 803 (2004) 77.
2. Y. Shim, J. Sakamoto, A. Suzuki, K. Khalilova etl. *Jpn. J. Appl. Phys.* 05FC14 (2011), 50.

Магнитные свойства массивов FeNi нанонитей при разных ориентациях внешнего магнитного поля

*А.П. Чумаков¹, И.В. Росляков², К.С. Напольский²,
А.А. Елисеев², D. Menzel³, С.В. Григорьев^{1,4}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

² *МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

³ *Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany*

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

В работе исследованы массивы упорядоченных железо-никелевых нанонитей различных концентраций. Плёнки Al_2O_3 толщиной 65 мкм с высокоупорядоченной гексагональной структурой пор ($a = 105$ нм) использовались в качестве шаблона для синтеза массивов нитевидных наночастиц [1]. Контролируемый рост нанонитей $Fe_xNi_{(1-x)}$ в матрице пористого Al_2O_3 проводили методом электрохимического осаждения в трёхэлектродной ячейке в потенциостатическом режиме. Были синтезированы образцы массивов нанонитей различного состава с постоянной концентрацией - А1 ($Fe_{38}Ni_{62}$), А2 ($Fe_{29}Ni_{71}$) и А3 ($Fe_{19}Ni_{81}$); и с переменной концентрацией $Fe_xNi_{(1-x)}$ вдоль нити – В1 ($35 < x < 45$), В2 ($25 < x < 53$) и В3 ($28 < x < 64$). Длина нанонитей варьировалась от 7 до 63 мкм.

Магнитные свойства образцов исследовали методом SQUID-магнитометрии. Измеряли гистерезисные кривые перемагничивания в диапазоне полей от -5 Тл до 5 Тл при ориентации оси нанонитей относительно направления внешнего магнитного поля, меняющейся в диапазоне углов α от 0 до 90°. Были проанализированы угловые зависимости коэрцитивной силы $H_c(\alpha)$. Установлено, что для всех образцов серии А зависимость $H_c(\alpha)$ плавно уменьшается с увеличением угла α . Однако, для образцов серии В с изменяющейся концентрацией Fe и Ni вдоль нити с увеличением α наблюдался рост значения H_c до 65° с последующим резким спадом до нуля при 90°. Согласно [2] поведение $H_c(\alpha)$, характерное для А серии, свидетельствует о типе перемагничивания нанонити по типу «когерентный поворот», тогда как для серии В перемагничивание происходит по типу «скручивание».

В работе установлено, что (i) условия электрохимического синтеза влияют на концентрацию двухкомпонентной системы FeNi; (ii) неоднородное распределение концентрации Fe и Ni вдоль нанонити приводит к увеличению коэрцитивной силы с ростом угла α .

1. H. Masuda and K. Fukuda, Science, **268**, 1466 (1995)

2. S. Goolaup, N. Singh, A.O. Adeyeye et al., Eur. Phys. J. B, **44**, 259 (2005)

Исследование магнитных свойств ферромагнитных структурированных и сплошных плёнок методом SQUID-магнитометрии

*И.С. Шишкин¹, А.А. Мистонов¹, Н.А. Григорьева¹, Д. Менцель²,
Н.А. Саполетова³, К.С. Напольский³, А.А. Елисеев³, С.В. Григорьев^{1,4}*

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

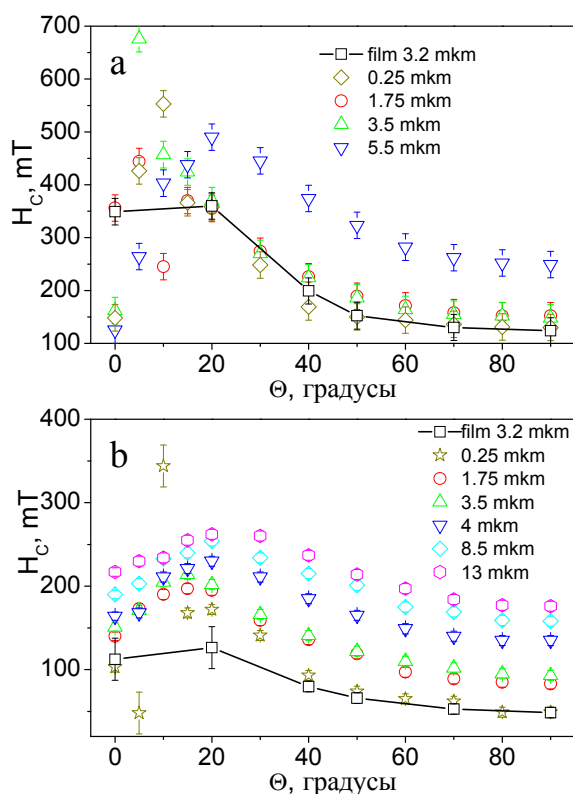
² Institute of Condensed Matter Physics, Braunschweig, Germany

³ Московский государственный университет, Москва, Россия

⁴ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Исследовалось поведение вектора намагниченности в сплошных и пространственно структурированных ферромагнитных плёнках в зависимости от величины ($-5\text{T} < H < 5\text{T}$) и направления внешнего магнитного поля методом SQUID – магнитометрии. Плёнки толщиной от 250 нм до 13 мкм синтезированы методом электрохимического осаждения Ni, или Co, в поры искусственного опала, сформированного из полистирольных микросфер, упорядоченных в ГЦК структуру с периодом решетки $a_0 = 720 \pm 20$ нм, с последующим удалением опаловой матрицы.

Исследования проводились для различных углов θ между \mathbf{H} и нормалью к плоскости образца от $\theta = 0^\circ$ – поле перпендикулярно плоскости до $\theta = 90^\circ$ – поле параллельно плоскости. Из кривых перемагничивания оценивались значения коэрцитивной силы H_C , поля насыщения H_S , остаточной намагниченности M_R и квадратичности M_R/M_S . Обнаружены особенности перемагничивания для кобальтовых и никелевых структурированных плёнок при θ от 0° до 20° . Магнитные свойства образцов описывались с учетом анизотропии атомарной структуры кристаллитов Ni и Co, двумерной анизотропии плёнки, трёхмерной анизотропии опалоподобной структуры, направления и величины напряжённости внешнего магнитного поля.



Угловые зависимости коэрцитивной силы для сплошных и структурированных плёнок на основе кобальта (а) и никеля (б) различной толщины

Исследование удельной электропроводности и магнитной восприимчивости околоэвтектических сплавов Pb-Bi

Д.А. Ягодин¹, Н.С. Угорова¹, С.А. Угоров²

¹ *Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия*

² *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В настоящей работе экспериментально исследованы температурные зависимости удельного электросопротивления и магнитной восприимчивости сплавов свинца с висмутом. Свинцово-висмутовая эвтектика рассматривается как перспективный тяжелый жидкометаллический теплоноситель (ТЖМТ).

Обзор литературных данных по фазовой диаграмме системы свинец-висмут показывает неопределённость около 2% по составу её эвтектической точки. В инженерных и технологических приложениях рекомендовано считать эвтектическим составом 45 ат. % Pb и температуру реакции 397.7 ± 0.6 К [1].

Все проведённые исследования следует разделить на низкотемпературные и высокотемпературные. В области низких температур от 2 до 300 К измерялась намагниченность образцов на магнетометре Cryogenic CFS-9T-CVTI, а также удельное электросопротивление четырёхзондовым контактным методом на этой же установке. При высоких температурах (от 300 до 1000 К) магнитная восприимчивость измерялась методом Фарадея, а удельное электросопротивление – методом вращающегося магнитного поля.

Обнаружено, что при низкой температуре образец с содержанием 44,8 ат. % Pb, переходит в сверхпроводящее состояние при температуре 8,7 К. Исследована зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода от величины внешнего магнитного поля. Из полевых зависимостей сопротивления и намагниченности экспериментально определены величины критических полей и оценена доля сверхпроводящей фазы.

При высокой температуре обнаружено изменение исследованных свойств вблизи точки эвтектической реакции. При этом данные удельной электропроводности дополнены исследованиями плотности гамма-методом. Наблюдается интересное объёмное явление изменения знака скачка плотности и связанное с ним изменение знака производной температурной зависимости электросопротивления при эвтектической температуре. Мы надеемся, используя полученные данные, проследить возможную корреляцию между изменениями исследованных свойств и параметрами эвтектической точки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-03-31566 мол_а

1. Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-hydraulics and Technologies / NUCLEAR ENERGY AGENCY ORGANISATION FOR ECONOMIC CO-OPERATION AND DEVELOPMENT, 2007, France, 693 p.

Электрические и гальваномагнитные эффекты в объёмных монокристаллах и в тонких плёнках твёрдых растворов $Bi_2(Te_{0,9}Se_{0,1})_3$

*Х.В. Алигулиева**, *Н.А. Абдуллаев*

Институт физики, Нац. Академия Наук Азерб., Баку, Азербайджан

Получены и исследованы стандартным четырёхзондовым методом электропроводность, магнитосопротивление и эффект Холла в объёмных монокристаллах и в тонких плёнках твёрдых растворов $Bi_2(Te_{0,9}Se_{0,1})_3$.

В отличие от объёмных кристаллов, в тонких плёнках $Bi_2(Te_{0,9}Se_{0,1})_3$ толщинами 600-800 нм проводимость демонстрирует термоактивационный («диэлектрический») характер, как показано на рис.1. Анализ экспериментально полученной температурной зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ при температурах ниже 100К выявил, что в температурном диапазоне 2,5 – 71К в тонких плёнках $Bi_2(Te_{0,9}Se_{0,1})_3$ перенос заряда осуществляется путём прыжков носителей заряда по локализованным состояниям с переменной длиной прыжка (т.н. «моттовская» проводимость).

$$\rho = \rho_0 \exp(T_0/T)^{1/4}, \quad T_0 = \beta / kg(\mu)a^3$$

здесь $g(\mu)$ - плотность локализованных состояний на уровне Ферми, a - радиус близких к уровню Ферми локализованных состояний, k - постоянная Больцмана, β - число, зависящее от размерности задачи.

Из полевой зависимости магнитосопротивления (рис.2) оценен радиус локализации носителей заряда a . Приведены также величины плотности локализованных состояний вблизи уровня Ферми $g(\mu)$ и средняя длина прыжка носителей заряда R .

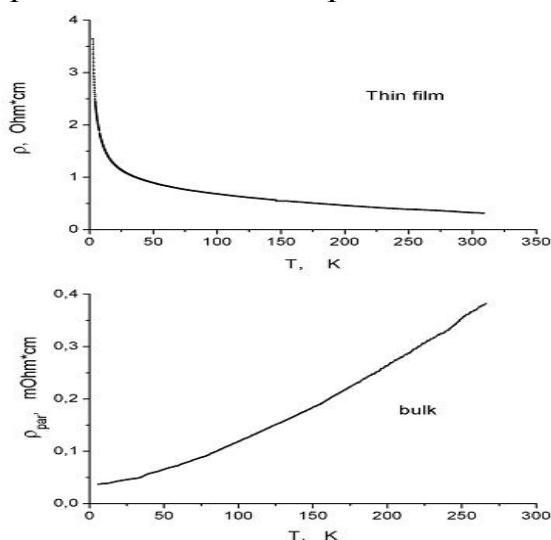


Рис.1 Темп зависимости удельная сопротивления

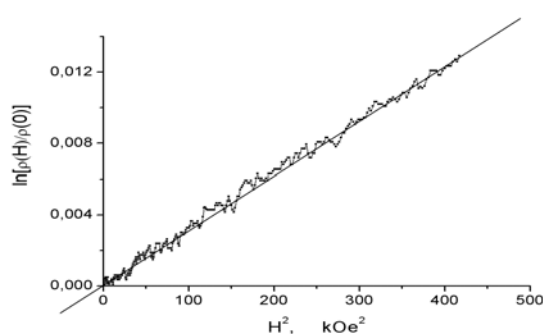


Рис.2 Полевая зависимость магнито сопротивления

Список участников

№	ФИО	Организация	E-mail	Стр.
1	Almasy Laszlo	WRC	almasy@mail.kfki.hu	
2	Lyubomirskiy Mikhail	ESRF	lyubomir@esrf.fr	31
3	Matasov Maxime	SSU	pooryork86@gmail.com	
4	Sainctavit Philippe	Institute of Mineralogy and the Physis of Condensed Media	Philippe.Sainctavit@upmc.fr	7
5	Smekhova Alevtina	МГУ им. М.В. Ломоносова	smeal@physics.msu.ru	162
6	Sollaku Xristos	НИТУ МИСиС	xristossollaku@gmail.com	
7	Абасзаде Рашад Габил оглы	НАНА	Abaszade@rambler.ru	62
8	Абубакаров Абу Геланиевич	НИИ Физики ЮФУ	abubakarov12@mail.ru	45
9	Абуова Фатима Усеновна	ЕНУ им Л.Н.Гумилева	Fatika_82@mail.ru	63
10	Аветисов Владик Аванесович	ИХФ РАН	vladik.avetisov@gmail.com	
11	Акимова Ксения Андреевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	ksenia.kedalo@gmail.com	20
12	Аксенов Сергей Михайлович	ИК РАН	aks.crys@gmail.com	21
13	Аксенов Сергей Николаевич	ИЯИ РАН	serg.asd@mail.ru	
14	Актерский Андрей	ПИЯФ НИЦ КИ	aaу2002@yandex.ru	
15	Александрова Ксения Сергеевна	МАГУ	chop-grifon@rambler.ru	64
16	Алигулиева Хаяла Вагиф	НАНА	xayala-firuza@mail.ru	175
17	Алиев Закир	ДГУ	zakiraliiev92@rambler.ru	
18	Алиев Гасан	ДГУ	gasanaliiev93@rambler.ru	
19	Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@mail.ru	135
20	Альев Юсиф Имрайыл	Бакинский институт повышения квалификации и переподготовки педагогических кадров	yusifafshar@gmail.com	103
21	Амарантов Сергей Владимирович	ИК РАН	amarantov_s@mail.ru	55
22	Андреев Всеволод Владимирович	ЧувГУ	andreev_vsevolod@mail.ru	46

23	Андроникова Дарья Александровна	СПбГПУ	andronikova.daria@gmail.com	
24	Арефьев Михаил	СПбГУ	arefievm@mail.ru	136
25	Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dmitri.aristov@gmail.com	
26	Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	18
27	Бармина Екатерина Сергеевна	НИТУ МИСиС	belayakoshka@mail.ru	137
28	Батурин Владимир Сергеевич	ФИАН	vsbat@yandex.ru	138
29	Баулин Роман Алексеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	romanbaulin17@gmail.com	
30	Баянов Глеб	СПбГУ		
31	Бельтюков Ярослав Михайлович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	ybeltukov@gmail.com	22
32	Беляев Сергей Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	spb@pnpi.spb.ru	
33	Белякова Наталья Сергеевна	СПбГПУ	pro100pro100@rambler.ru	23
34	Боднарчук Виктор Иванович	ОИЯИ	bodnarch@nf.jinr.ru	
35	Бойцова Ольга	МГУ им. М.В. Ломоносова	boytsova@gmail.com	47
36	Болдырева Елена Владимировна	ИХТТМ СО РАН	eboldyрева@yahoo.com	10
37	Бордовицын Владимир Александрович	ТГУ	vabord@sibmail.com	
38	Борисов Сергей Аркадьевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	sborisov@pnpi.spb.ru	
39	Борисова Полина Алексеевна	НИЦ "Курчатовский институт"	borisovapa@mail.ru	104
40	Боркунов Родион Юрьевич	БФУ им. И. Канта	rborkunov@mail.ru	
41	Босак Алексей Алексеевич	ESRF	bossak@esrf.fr	8
42	Бочаров Дмитрий	Латвийский университет	bocharov@latnet.lv	65
43	Бугров Александр Николаевич	ИВС РАН	Bugrov.an@mail.ru	
44	Булавин Максим Викторович	ОИЯИ	bulavin85@inbox.ru	
45	Булат Сергей	ПИЯФ НИЦ КИ	bulat@omrb.pnpi.spb.ru	15
46	Быков Виктор Анатольевич	ИМЕТ УрО РАН	wildrobert@gmail.com	139
47	Васильева Людмила Анатольевна	ЧувГУ	ask_lyuda@mail.ru	

48	Васюков Денис Михайлович	ИК РАН	vasyukov@physics.msu.ru	
49	Величко Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgen.velichko@lns.pnpi.spb.ru	105
50	Вербенко Илья Александрович	НИИ Физики ЮФУ	ilich001@yandex.ru	140
51	Верхоглядов Александр Евгеньевич	ОИЯИ	verhoglyadov_al@mail.ru	106
52	Вишня Юлия Петровна	НИФТИ ННГУ	uvishnya@yandex.ru	141
53	Волков Василий Владимирович	СамГУ	volvvv@mail.ru	
54	Вомпе Татьяна Алексеевна	ИМЕТ РАН	tvompe@gmail.com	142
55	Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	gavrilov@pnpi.spb.ru	
56	Гаврилов Виктор Николаевич	Физико-энергетический институт	mdmi9try@delfi.lv	107
57	Галимзянов Руслан Равильевич	НИТУ МИСиС	gal_ruslan@yahoo.com	
58	Гапон Игорь Васильевич	ОИЯИ	gapon@jinr.ru	108
59	Гартвик Андрей Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gartwik@mail.ru	
60	Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gerashch@pnpi.spb.ru	143
61	Гинзбург Саул Лейбович	ПИЯФ НИЦ КИ	ginzbsl@mail.ru	
62	Гойхман Александр Юрьевич	БФУ им. И. Канта	AGoikhman@innopark.kantiana.ru	
63	Голосовский Игорь Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	golosov@mail.pnpi.spb.ru	
64	Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	
65	Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
66	Григорькин Алексей Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ale-grig@yandex.ru	
67	Грузинов Андрей Юрьевич	НИЦ "Курчатовский институт"	angruzinov@gmail.com	57
68	Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	
69	Гурьевской Денис Валерьевич	СПбГУ	YumovD@gmail.com	
70	Гурьянов Антон Алексеевич	ЧГПУ им. И.Я. Яковлева	ds7244@chebnet.com	

71	Гусейнов Гусейн Джалил	Институт Физики НАН РА	huseyn-1978@mail.ru	144
72	Данг Нгок Тоан	ОИЯИ	dangtoan2107@jinr.ru	109
73	Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	66
74	Демишев Сергей Васильевич	ИОФ РАН	demis@lt.gpi.ru	16
75	Дерябина Вера Валерьевна	НГТУ	vera_dvv@mail.ru	24
76	Димакова Елизавета	ПИЯФ НИЦ КИ	lisabeta777@mail.ru	110
77	Дмитриев Алексей Иванович	ИПХФ РАН	aid@icp.ac.ru	48
78	Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	
79	Дмитричева Елена Вячеславовна	ИК РАН	MsDmitrichEVa@yandex.ru	49
80	Дорошева Анна Андреевна	ЮФУ	dorosheva.a@ya.ru	
81	Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	ilya.dubitskiy@mail.ru	67
82	Дубровский Александр Федорович	СПБГПУ	dubrovich.exe@mail.ru	
83	Дядькин Вадим Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	dyadkin@lns.pnpi.spb.ru	
84	Евгенова Ирина Сергеевна	ГБУ КО "РЦО"	irinaevgenova@gmail.com	
85	Евстигнеева Надежда Викторовна	НовГУ	Nadya1203.89@mail.ru	68
86	Ездакова Ксения	ПИЯФ НИЦ КИ	voroninakv@lns.pnpi.spb.ru	25
87	Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	eliseev@inorg.chem.msu.ru	
88	Ельникова Лилия Вячеславовна	ГНЦ РФ ИТЭФ	elnikova@itep.ru	69
89	Еремин Роман Александрович	ОИЯИ	era@jinr.ru	111
90	Ершов Петр	БФУ им. И. Канта	fofan89@mail.ru	26
91	Жогин Иван Львович	НПП "Буревестник"	zhogin@mail.ru	50,70
92	Забенкин Владимир Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	zabenkin@pnpi.spb.ru	
93	Захаров Борис Александрович	ИХТТМ СО РАН	b.zakharov@yahoo.com	27
94	Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	zobkalo@pnpi.spb.ru	
95	Иваненко Алиса Игоревна	НовГУ, ИХТТМ СО РАН	alisa-ivanenko@yandex.ru	58

96	Иванов Алексей Валерьевич	ЧГПУ им. И.Я. Яковлева	alexputen@rambler.ru	
97	Иванова Наталья Анатольевна	НИЯУ МИФИ	uran-o2@yandex.ru	145
98	Иванская Наталья Николаевна	УВАУ ГА (И)	naivanskaya@yandex.ru	28
99	Иваньков Александр Игоревич	ОИЯИ	ivankov@jinr.ru	
100	Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова	ivitcheva@mail.ru	146
101	Иносов Дмитрий Сергеевич	MPI-FKF	d.inosov@fkf.mpg.de	11
102	Иоффе Александр Исаакович	JCNS	a.ioffe@fz-juelich.de	19
103	Ищенко Татьяна Васильевна	ИОФ РАН	demis@lt.gpi.ru	71
104	Казимиров Вячеслав Юрьевич	ОИЯИ	vkazimir@yahoo.com	
105	Казимирова Наталья Юрьевна	ОИЯИ	nkazimirov1@yahoo.com	
106	Калагов Георгий Алибекович	СПбГУ	ktkp@mail.ru	
107	Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	
108	Канзулов Никита Игоревич	МАГУ	niki-87.91@mail.ru	72
109	Карпов Иван Дмитриевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	fizic32@yandex.ru	
110	Кассан-Оглы Феликс Александрович	ИФМ УрО РАН	felix.kassan-ogly@imp.uran.ru	73
111	Кибалин Юрий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	jurikibalin@gmail.com	
112	Климонт Анастасия Александровна	НИТУ МИСиС	nklimont@gmail.com	147
113	Клюева Мария Вячеславовна	НИТУ МИСиС	23sh82vd@gmail.com	51
114	Кобылянская Екатерина Геннадьевна	IFRA	cathie@lns.pnpi.spb.ru	
115	Ковалев Анатолий Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kovalev@pnpi.spb.ru	112
116	Коваленко Екатерина Сергеевна	РНИЦ "Курчатовский институт"	kovalenko_es@mail.ru	113
117	Козинкина Елена Александровна	ЮФУ	y_kozinkina@mail.ru	
118	Коляда Михаил Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	mihail.kolyada@gmail.com	114

119	Кондулукова Дарья Александровна	СПбГПУ	dasha557755@mail.ru	
120	Коневцова Ольга Викторовна	ЮФУ	khelgla@yandex.ru	59
121	Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	74
122	Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@lns.pnpi.spb.ru	
123	Коплак Оксана	ИПХФ РАН	o.koplak@gmail.com	75
124	Коровин Александр Михайлович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	amkorovin@gmail.com	29
125	Кравченко Сергей Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ks-spb@mail.ru	
126	Криштоп Виктор Владимирович	ДВГУПС	krishtop@list.ru	
127	Кулипанов Геннадий Николаевич	ИЯФ СО РАН	kulipanov@inp.nsk.su	6
128	Кунцевич Андрей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kuncevich_andrei@mail.ru	115
129	Курбаков Александр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	kurbakov@pnpi.spb.ru	
130	Лазебник Иосиф Моисеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	lazebnik@pnpi.spb.ru	
131	Лазута Александр	ПИЯФ НИЦ КИ	alexandr@VL9467.spb.edu	
132	Ларионова Настасья Сергеевна	ФТИ УрО РАН	Nastasya2601@mail.ru	148
133	Лебедев Виктор Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	lebedev@pnpi.spb.ru	
134	Лепешкин Сергей Владимирович	ФИАН	lepehkin@lpi.ru	
135	Литвин Александр Петрович	НИУ ИТМО	litvin88@gmail.com	149
136	Ломачук Юрий Вячеславович	ПИЯФ НИЦ КИ	jeral2007@gmail.com	30
137	Лошак Наталия Васильевна	ОИЯИ	natalialoshak@gmail.com	60
138	Луговской Андрей Вячеславович	НИТУ МИСиС	andrey.lugovskoy@gmail.com	76
139	Львов Дмитрий Владимирович	ГНЦ РФ ИТЭФ	lvov@itep.ru	77
140	Лянге Мария Викторовна	НИТУ МИСиС	maria.lyange@gmail.com	
141	Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	maleyevsv@mail.ru	17
142	Манида Сергей Николаевич	СПбГУ	sergey@manida.com	12

143	Маношин Сергей Александрович	ОИЯИ	manoshin@nf.jinr.ru	116
144	Маркова Юлия Николаевна	ИГХ	markova.julia.igc@yandex.ru	32
145	Маслов Алексей	ВГТУ	jetkin@mail.ru	
146	Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	117
147	Мацко Никита Леонидович	ФИАН	matsko@lpi.ru	78
148	Машенко Матвей Сергеевич	СамГУ	matvej.mashenko@gmail.com	118
149	Меттус Денис Евгеньевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	mettus@physics.msu.ru	
150	Миронов Владимир Сергеевич	ИК РАН	mirsa@list.ru	14
151	Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	79
152	Могилюк Тарас Игоревич	НИЦ "Курчатовский институт"	5taras@mail.ru	80
153	Морозов Максим Сергеевич	СамГУ	maxymor@mail.ru	
154	Мурзашев Аркадий Ислибаевич	МАГУ	nanotubes59@mail.ru	81
155	Муругова Татьяна Николаевна	ОИЯИ	murugova@jinr.ru	
156	Мухин Константин Александрович	JCNS	kostik001@mail.ru	
157	Мушенок Федор Борисович	ИПХФ РАН	mushenokf@ya.ru	150
158	Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru	
159	Нагорный Анатолий Васильевич	ОИЯИ	avnagorny@jinr.ru	119
160	Назарова Татьяна Эдуардовна	МАГУ	dily-1988@rambler.ru	82
161	Накин Андрей Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	andrey.nakin@gmail.com	
162	Напольский Кирилл Сергеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	knapolsky@gmail.com	
163	Немченко Екатерина Александровна	ТГУ	katusha77@sibmail.com	83
164	Никитина Маргарита Александровна	СПбГУ	margaritnikitina@yandex.ru	84
165	Никоноров Андрей Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	AndreyNikonorov@yandex.ru	

166	Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyanikov_a_k@mail.ru	
167	Озерин Алексей Юрьевич	ИФВД РАН	m12sl@yandex.ru	
168	Окорокров Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov@pnpi.spb.ru	5
169	Орешко Алексей Павлович	МГУ им. М.В. Ломоносова	oreshko@mail.ru	85
170	Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv@samsu.ru	151
171	Павелко Алексей Александрович	НИИ Физики ЮФУ	dipoleglass@gmail.com	152
172	Павленко Анатолий Владимирович	НИИ Физики ЮФУ	tolik_260686@mail.ru	
173	Павлов Никита Сергеевич	ИЭФ УрО РАН	pavlovns@gmail.com	86
174	Павлов Федор Федорович	СПбГПУ	pavlovfedor@mail.ru	87
175	Панкратьев Федор Сергеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	fpankr@gmail.com	153
176	Папушкин Игорь Викторович	ОИЯИ	piv@nf.jinr.ru	120
177	Перунов Игорь Владимирович	ИК РАН	qazqwerl@mail.ru	
178	Петров Сергей Степанович	СамГУ	serpetl@yandex.ru	88
179	Петров Сергей Николаевич	СПбГУ	sergeypspb@mail.ru	
180	Петрунин Вадим Федорович	НИЯУ МИФИ	VFPetrinin@mephi.ru	
181	Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pnk@pnpi.spb.ru	
182	Покоев Александр Владимирович	СамГУ	pokoev@samsu.ru	89
183	Поликарпов Максим Валерьевич	НИЯУ МИФИ	polikarpov.maxim@mail.ru	33
184	Пономарева Алина Александровна	СПбГЭТУ "ЛЭТИ"	ap_k@inbox.ru	154
185	Попов Александр Николаевич	ESRF	apopov@esrf.fr	
186	Попова Елена Алексеевна	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	elena.popova566@gmail.com	34
187	Потапова Надежда Михайловна	ПИЯФ НИЦ КИ	potapova@lns.pnpi.spb.ru	121,122
188	Прошкин Алексей Игоревич	ИФМ УрО РАН	al.pro@list.ru	52

189	Пряничников Степан Викторович	Институт металлургии УрО РАН	stepian@yandex.ru	155
190	Разумная Анна Григорьевна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	156
191	Райтман Эрнст Аронович	Физико-энергетический институт	eraitmans@apollo.lv	123
192	Редьков Алексей	СПБГПУ	red-alex@mail.ru	
193	Робук Виктор Николаевич	ОИЯИ	robuk@jinr.ru	90
194	Родионов Игорь Дмитриевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	rodionovID@yandex.ru	
195	Росляков Илья	МГУ им. М.В. Ломоносова	ilya.roslyakov@gmail.com	35
196	Рубцов Арсений Борисович	ОИЯИ	arseniy.rubtsov@gmail.com	124
197	Румянцева Юлия Игоревна	СамГУ	JulashaRumyasha@mail.ru	
198	Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov@pnpi.spb.ru	
199	Рунова Майна Константиновна	ПИЯФ НИЦ КИ	runova@pnpi.spb.ru	
200	Руткаускас Антон Владимирович	ОИЯИ	antonkas71@gmai.com	125
201	Рыжов Вячеслав Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	157
202	Рябухина Марина Викторовна	ИФМ УрО РАН	ryabukhina@imp.uran.ru	126
203	Савинский Сергей Степанович	УдГУ	savinsky@uni.udm.ru	91
204	Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ НИЦ КИ	savitska@inbox.ru	13
205	Сагань Ярослав Игоревич	ОИЯИ	yaroslav_sagan@mail.ru	127
206	Садьков Хизир Амирович	НИИ Физики ЮФУ	hizir-2010@mail.ru	158
207	Саламатин Денис Александрович	МФТИ	dasalam@gmail.com	159
208	Самойленко Сергей Александрович	ОИЯИ	samoilenko_pp@mail.ru	128
209	Самсонов Алексей Михайлович	ЧГПУ им.И.Я.Яковлева	cheb87@inbox.ru	
210	Сарапин Глеб Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	sarapin.gleb@gmail.ru	160
211	Саунина Светлана Ивановна	ЧелГУ	saunina@csu.ru	36
212	Серегин Максим Сергеевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	horanzon@gmail.com	130

213	Сизанов Алексей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	alexey.sizanov@gmail.com	92
214	Сиколенко Вадим Витальевич	ОИЯИ	vadim.sikolenko@jinr.ru	
215	Симоненко Николай Петрович	ИОНХ РАН	n_simonenko@mail.ru	54
216	Симоненко Елизавета Петровна	ИОНХ РАН	ep_simonenko@mail.ru	53
217	Скрипников Леонид Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	leonidos239@gmail.com	93
218	Скуратов Виталий Алексеевич	ОИЯИ	Vitaly77770@mail.ru	
219	Сметюхова Татьяна Николаевна	НИТУ МИСиС	smetyukhova.t.n@yandex.ru	161
220	Смирнов Олег Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	osmirnov@pnpi.spb.ru	
221	Смыслов Руслан Юрьевич	ИВС РАН	urs@mail.macro.ru	
222	Снигирев Анатолий Александрович	ESRF	snigirev@esrf.fr	
223	Соколов Александр Иванович	СПбГУ	ais2002@mail.ru	4
224	Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	aosorokin@gmail.com	94
225	Соседова Маргарита	ТППУ	sosedova@tspu.edu.ru	95
226	Старовойтов Антон Андреевич	НИУ ИТМО	anton.starovoytov@gmail.com	163
227	Степанов Антон Викторович	ЧПИ	for.antonstep@gmail.com	
228	Струков Генналий Васильевич	ИФТТ РАН	struk@issp.ac.ru	
229	Струкова Галина Кузьминична	ИФТТ РАН	strukova@issp.ac.ru	
230	Суворова Людмила Алексеевна	МАГУ	suv87l@mail.ru	96
231	Сулейманов Наиль Муратович	КФТИ	nail.suleimanov@mail.ru	129
232	Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ НИЦ КИ	asyromyatnikov@yandex.ru	
233	Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	svg@pnpi.spb.ru	

234	Таланов Михаил Валерьевич	ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	164
235	Тарнавич Владислав Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	
236	Ташпулатов Тимур Рустамович	НИТУ МИСиС	timowelle@gmail.com	97
237	Тимофеев Владимир Игоревич	ИК РАН	tostars@mail.ru	61
238	Тимофеев Виктор Евгеньевич	СПбГУ	timofeevictor@gmail.com	
239	Тимченко Николай Алексеевич	ТПУ	timchenko@tpu.ru	
240	Титов Анатолий Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	titov@pnpi.spb.ru	98
241	Томчук Александр Васильевич	ОИЯИ	tomchuk@jinr.ru	165
242	Томчук Алина Алексеевна	ОИЯИ	a.kaznacheevskaya@mail.ru	132
243	Трунина Ирина Витальевна	НИТУ МИСиС	trunchik11@yandex.ru	166
244	Трунов Дмитрий Николаевич	ИЯИ РАН	redmitr@yandex.ru	
245	Труханов Алексей Валентинович	ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению"	truhanov86@mail.ru	167
246	Турков Вадим Константинович	НИУ ИТМО	vadim.turkov@gmail.com	
247	Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	turchenko@jinr.ru	168
248	Тюлюсов Антон Николаевич	ГНЦ РФ ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	
249	Тюняев Андрей Александрович	ВЦ РАН	dazzle@ropnet.ru	99
250	Уклеев Виктор Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	37
251	Упоров Сергей Александрович	Институт металлургии УрО РАН	segga@bk.ru	169
252	Упорова Наталья Сергеевна	УрГПУ	fominans@rambler.ru	170
253	Утесов Олег Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	utiosov@gmail.com	100
254	Федоров Владимир Викторович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	vfedorov@fl.ioffe.ru	38
255	Федотов Андрей Александрович	СамГУ	andrew.f.box@mail.ru	
256	Филиппов Сергей	ИМС	sfill225@gmail.com	39
257	Формозов Андрей Алексеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	formozoff@gmail.com	

258	Халилова Хураман Нусрат кызы	Институт Физики НАН РА	x.khalilova@rambler.ru	171
259	Хамова Тамара Владимировна	ИХС	LTPP@rambler.ru	40
260	Черепенников Юрий Михайлович	ТПУ	che@scalpnet.ru	
261	Чернышов Дмитрий Юрьевич	ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	
262	Четвериков Юрий Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	Yurii.Chetverikov@pnpi.spb .ru	
263	Чижиков Вячеслав Анатольевич	ИК РАН	chizhikov@ns.crys.ras.ru	101
264	Чувашова Ирина	МГУ им. М.В. Ломоносова	irina.chuvashova@gmail.co m	133
265	Чумаков Александр Игоревич	ESRF	chumakov@esrf.fr	9
266	Чумаков Андрей Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakov@lns.pnpi.spb.ru	172
267	Чумакова Александра	ПИЯФ НИЦ КИ	vasilieva@lns.pnpi.spb.ru	41
268	Чурьянова Анна Геннадьевна	ОИЯИ	churyanova@gmail.com	
269	Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	mischar@mail.ioffe.ru	42
270	Швецова Наталья Юрьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	nafanya_9888@mail.ru	
271	Шестаков Александр Евгеньевич	РФЯЦ-ВНИИТФ	a.e.shestakov@list.ru	102
272	Шишкин Иван Сергеевич	СПбГУ	shishkin-ivan@list.ru	173
273	Шурыгина Виктория Александровна	СамГУ	Shuryginantf@yandex.ru	
274	Юшков Артем Игоревич	БФУ им. И. Канта	edgarhubert@gmail.com	43
275	Ягодин Денис Анатольевич	УрГПУ	DYagodin@yandex.ru	174
276	Яковенко Екатерина Владимировна	РНЦ "Курчатовский институт"	eyakovenko@list.ru	134
277	Якунина Елена Михайловна	ИФМ УрО РАН	eyakuninaart@gmail.com	44
278	Ясинская Елена Витальевна	БФУ им. И. Канта	veya_2002@mail.ru	