



Программный комитет

Председатель: Григорьев Сергей Валентинович, д.ф.-м.н.

М.В. Авдеев, д.ф.-м.н. – заместитель председателя

В.Л. Аксенов, член-корр. РАН, д. ф.-м. н., проф.

В.И. Боднарчук, к. ф.-м. н.

В.В. Волков, д.х.н.

А.А. Воробьев, к. ф.-м. н.

А.И. Иоффе, к. ф.-м. н.

В.В. Исаев-Иванов, к. ф.-м. н.

Е.А. Кравцов, к. ф.-м. н.

В.Т. Лебедев, д. ф.-м. н.

А.И. Окороков, д. ф.-м. н., проф.

Н.К. Плешанов, к. ф.-м. н.

В.В. Рунов, к. ф.-м. н.

В.В. Тарнавич, к. ф.-м. н.

Б.П. Топерверг, к. ф.-м. н.

Организационный комитет

Председатель: Н.М. Чубова, к.ф.-м.н.

Секретарь: Е.С. Лихолетова, к.т.н.

Информационная поддержка: М.А. Голубев

Техническое обеспечение: Н.Н. Губанова

Финансовые вопросы: Н.А. Куга

Визовая поддержка: Н.В. Никитина, Р.А. Жеронкина

E-mail: workshop@lns.pnpi.spb.ru

<https://oiks.pnpi.spb.ru/events/muromets2017>



Организаторы и спонсоры



НИЦ «Курчатовский институт» -
ПИЯФ
<http://www.pnpi.nrcki.ru>



НИЦ «Курчатовский институт»
<http://www.nrcki.ru>



Российский фонд фундаментальных исследований. Программа «Конкурс проектов организации российских и международных научных мероприятий, проводимый РФФИ», соглашение о гранте 17-02-20509 - г.
<http://www.rfbr.ru>



Российское
Нейтронграфическое
Общество

Российское нейтронграфическое общество
<http://rosneutro.ru>



European Commission

Программе исследований и инноваций Горизонт 2020 Европейской комиссии, соглашение о гранте 654166.
<https://ec.europa.eu/commission>



Объединенный институт ядерных исследований –
Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка
<http://www.jinr.ru/>
<http://flnph.jinr.ru/en/>



ООО «Изовак»
<http://www.izovac.com/>

MIRROTRON LTD
Neutron Optics & Instruments

Mirrotron Ltd.
<http://www.mirrotron.hu/>





МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



СРЕДА, 20 СЕНТЯБРЯ 2017 г.		
8.30 – 9.00	Регистрация (большой конференц-зал 7 корпуса)	
9.00 – 9.10	Приветствие участникам конференции	
9.10 – 9.40	Е.В. Москвин НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Современное состояние дел и перспективы малоуглового рассеяния и рефлектометрии нейтронов на российских нейтронных источниках.
Сессия I. Магнетизм и малоугловая дифракция. Председатель: С.В. Григорьев		
9.40 – 10.00	А.А. Мистонов НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Как узнать распределение намагниченности в трёхмерной периодической ферромагнитной мезоструктуре?
10.00 – 10.20	Т.А. Ноговицина ИФМ УрО РАН, Екатеринбург	Спиновый ближний порядок и киральные флуктуации в MnSi.
10.20 – 10.40	Н.М. Чубова НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Влияние критических флуктуаций на появление А-фазы в соединении FeGe.
10.40 – 11.00	А.А. Быков НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Сверхпроводящие пузыри или сверхпроводимость тонкого слоя на поверхности ВТСП гранул $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$.
11.00 – 11.20	Н.Е. Савицкая НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Динамика магнитного потока в перколяционном сверхпроводнике $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$. Математическая модель.
11.20 – 11.50	Перерыв, кофе-брейк (малый зал 7 корпуса)	



**Сессия II. Спиновая динамика гелимагнетиков
и малоугловое рассеяние нейтронов.
Председатель: Н.М. Чубова**

11.50 – 12.20	С.В. Григорьев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Спиновые волны в гелимагнетике $Mn_{1-x}Fe_xSi$: исследование методом малоуглового рассеяния нейтронов.
12.20 – 12.40	К.А. Пшеничный НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Расчет сечения малоуглового рассеяния нейтронов на спиновых волнах в гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория.
12.40 – 13.00	Е.В. Алтынбаев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Малоугловое рассеяние нейтронов и симметричное обменное взаимодействие в нецентросимметричном соединении $MnGe$.
13.00 – 15.00	Перерыв, обед	

**Сессия III. Слоистые структуры. Рефлектометрия.
Председатель: В.В. Гарнавич**

15.00 – 15.30	M.P. Wolff Uppsala University, Uppsala	New light on an old problem: the solid liquid boundary condition.
15.30 – 16.00	М.В. Авдеев ОИЯИ, Дубна	Нейтронная рефлектометрия на интерфейсах с жидкими и мягкими средами на реакторе ИБР-2 ОИЯИ.
16.00 – 16.20	М.В. Рябухина ИФМ УрО РАН, Екатеринбург	Магнетизм редкоземельных сверхрешеток.
16.20 – 16.50	Перерыв, кофе-брейк (малый зал 7 корпуса)	



16.50 – 17.10	Н.О. Антропов ИФМ УрО РАН, Екатеринбург	Структурный и магнитные свойства сверхрешеток Fe/Pd/Gd.
17.10 – 17.30	Ю.А. Саламатов ИФМ УрО РАН, Екатеринбург	Экспериментальное уточнение характеристик рассеяния нейтронов опорным слоем гадолиния.
17.30 – 17.50	Е.С. Никова ИФМ УрО РАН, Екатеринбург	Восстановление фазы коэффициента отражения нейтронов в эксперименте с опорным слоем гадолиния.
17.50 – 18.00	Награждение победителя в номинации «Доклад дня»	
18.00 – 21.00	Фуршет по случаю открытия конференции (Автобус от площади НИЦ «КИ» – ПИЯФ)	
С.В. Григорьев. Российское нейтронографическое общество: состояние дел и перспективы развития.		



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



ЧЕТВЕРГ, 21 СЕНТЯБРЯ 2017 г.

**Сессия IV. МУР нейтронов для исследований биорелевантных систем.
Председатель: М.В. Авдеев**

9.10 – 9.30	М.А. Киселев ОИЯИ, Дубна	Структура нанолекарств.
9.30 – 9.50	Д.В. Лебедев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Структурная кинетика бактериальной рибосомы по данным ВРМУРР.
9.50– 10.10	А.В. Швецов НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	New computational method to get D ₂ O/H ₂ O contrast from all-atom molecular dynamics trajectories for large biomacromolecular complexes.
10.10 – 10.30	Ю.Е. Горшкова ОИЯИ, Дубна	Структура и взаимодействие липидных мембран в присутствии ионов кальция и полярных молекул по данным малоуглового рассеяния нейтронов.
10.30 – 10.50	Р.Ю. Смыслов НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	К вопросу о структуре нативной целлюлозы <i>Glucoacetobacter xylinus</i> .
10.50 – 11.20	Перерыв, кофе-брейк (малый зал 7 корпуса)	
Сессия V. Фрактальная концепция в исследованиях конденсированного состояния. Председатель: В.В. Рунов		
11.20 – 11.50	И.А. Краснов IEAR, Uni-Kiel, Kiel	Исследование шелка методами рассеяния insitu.
11.50 – 12.10	Е.Г. Яшина НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Фрактальная концепция и малоугловое рассеяние нейтронов.



12.10 – 12.30	А.В. Томчук ОИЯИ, Дубна	Анализ малоуглового рассеяния стохастическими массовыми фракталами.
12.30 – 12.50	А.А. Зинчик Университет ИТМО, Санкт-Петербург	Расчет фрактальной размерности регулярных фракталов по картине дифракции в дальней зоне.
12.50 – 13.10	Н.В. Петров Университет ИТМО, Санкт-Петербург	Моделирование распространения волнового фронта в рамках скалярной теории дифракции.
13.10 – 13.30	М.Д. Матасов НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Рассеяние когерентного оптического излучения нерегулярной квазипланарной фрактальной структурой.
13.30 – 14.30	Перерыв, обед	
14.30 – 15.30	Постерная сессия (большой конференц-зал 7 корпуса)	
15.30 – 15.40	Награждение победителя в номинации «Доклад дня»	
15.50 – 20.00	Экскурсия в Санкт-Петербург (Автобус от площади НИЦ «КИ» – ПИЯФ)	



ПЯТНИЦА, 22 СЕНТЯБРЯ 2017 г.

**Сессия VI. МУР нейтронов для исследований в области химии и материаловедения.
Председатель: Ю.Е. Горшкова**

9.10 – 9.30	Н.А. Григорьева СПбГУ, Санкт-Петербург	Малоугловая дифракция синхротронного излучения для исследования иерархических структур: мифы и реальные возможности.
9.30 – 9.50	Ю.В. Кульвелис НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Особенности строения изотропных и анизотропных протонпроводящих мембран.
9.50 – 10.05	М.В. Суясова НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Многоуровневые структуры фуллеренолов и металлофуллеренолов в водных растворах по результатам нейтронных и рентгеновских экспериментов.
10.05 – 10.20	Т.В. Нагорная ОИЯИ, Дубна	Структурные характеристики кластерообразования фуллеренов в смеси полярный / неполярный растворитель.
10.20 – 10.50	Перерыв, кофе-брейк (малый зал 7 корпуса)	
10.50 – 11.10	В.Т. Лебедев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Прямые и обращенные мицеллы полимеризующихся мономеров в водных и водно-диоксановых растворах по данным рассеяния нейтронов.
11.10 – 11.30	Г.П. Копица НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Морфология наноструктурированного оксигидроксида алюминия.
11.30 – 11.45	Н.В. Цвигун ИК РАН, Москва	Золь-гель синтез высокодисперсного оксида ZrTiO ₄ и эволюция его структуры при термической обработке.
11.45 – 12.00	Ю.В. Ларичев ИК СО РАН, Новосибирск	Исследование процессов агрегации наночастиц в смешанных золях и аэрогелях методом МУРР.



12.00 – 14.00	Перерыв, обед	
Сессия VII. Установки и техника МУР нейтронов. Председатель: Н.К. Плешанов		
14.00 – 14.20	Н. Eckerlebe Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht	Methods of Calibration of a Neutron Small Angle Scattering Instrument during Commissioning and Operation.
14.20 – 14.35	В.С. Литвин ИЯИ РАН, Москва	Установка ГОРИЗОНТ. Первые эксперименты по малоугловому рассеянию на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН.
14.35 – 14.50	А.В. Смирнов Университет ИТМО, Санкт-Петербург	Малоугловое рассеяние: размеры глобулярных и вытянутых частиц в растворе, определяемые методом Гинье, занижены.
14.50 – 15.10	С.И. Поташев ИЯИ РАН, Москва	Исследование характеристик позиционно - чувствительного детектора нейтронов с активным слоем ^{10}B .
15.10 – 15.40	Перерыв, кофе-брейк (малый зал 7 корпуса)	
Сессия VIII. Малоугловое рассеяние на реакторе ПИК. Председатель: Е.В. Москвин		
15.40 – 15.55	П.И. Коник НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Нейтронороды для малоугловых установок и рефлектометров на реакторе ПИК.
15.55 – 16.10	И.С. Шишкин НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Малоугловой дифрактометр поляризованных нейтронов SANS-2.
16.10 – 16.30	W.H. Kraan TU Delft, Delft	Finding the empty-beam-calibration for a SESANS setup in a beam line at PIK.



**Сессия IX. Рефлектометрия на реакторе ПИК.
Председатель: П.И. Коник**

16.30 – 16.50	Н.К. Плешанов НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	О проектировании нейтронных рефлектометров на реакторе ПИК.
16.50 – 17.10	В.В. Гарнавич НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	NERO: рефлектометр поляризованных нейтронов для реактора ПИК.
17.10 – 17.30	В.Г. Сыромятников НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Нейтронный прерыватель нового типа и его использование в эксперименте.
17.30 – 17.40	Награждение победителя в номинации «Доклад дня»	
17.40	Заккрытие конференции	



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



ПОСТЕРНАЯ СЕССИЯ (14.30 – 15.30, четверг, 21 сентября 2017 г.)	
В. Angelov Institute of Physics, ELI Beamlines, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague	A SAXS study of mesoporous internally nanostructured lipid particles for combination therapies.
А.А. Nabiyeu Joint Institute for Nuclear Research, Dubna	Structural studies of dielectric HDPE+ZrO ₂ polymer nanocomposites.
Р.Г. Абасзаде НАНА, Баку	Механизм рассеяния в наноструктурах АЗБ5.
Л.А. Азарова НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Модель фрактальной частицы гидратированного оксида циркония: интерпретация данных малоуглового рассеяния нейтронов.
В.Ю. Байрамуков НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Исследование структуры пиролизатов дифталоцианинов металлов методом МУРН.
О. Градов ОИЯИ, Дубна	Малоугловое рассеяние нейтронов как инструмент установления корректности ультраструктурных биологических моделей и разрешения противоречий мембранных и фазовых моделей.
И.Д. Дмитриев МГУ, Москва	Везикулярная структура нанолечения Доксолип.
И.С. Дубицкий СПбГУ, Санкт-Петербург	Зависимость магнитных свойств инвертированных опалов от толщины контактов: пределы применимости модели спинового льда.
В.В. Егоров НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Структура комплекса лактоферрина и олеиновой кислоты.
В.Н. Забенкин НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Концепция нейтронного рефлектометра ЛИРА с эллиптическими зеркалами для исследования жидких систем.
А.В. Ковалев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Интерференция нейтронных волн при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов на ферромагнитных сплавах.



Г.П. Копица НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	SANS3 и DCD: установки малоуглового рассеяния нейтронов для материаловедения.
В.А. Маслова ОИЯИ, Дубна	Структура мицелл холата натрия.
В.А. Матвеев НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Концепция светосильного нейтронного рефлектометра СОНАТА на реакторе ПИК.
П.М. Пустовойт НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Определение фрактальной размерности геометрических фракталов с помощью оптического Фурье преобразования.
И.А. Сафиулина НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина; СПбГУ, Санкт-Петербург	Исследование мезоскопической структуры моногерманидов переходных металлов методом малоуглового рассеяния нейтронов.
А.А. Сжогина НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Полимерные комплексы с эндофуллеренами железа - анализ строения и упорядочения в растворах методом малоуглового рассеяния нейтронов.
В.Г. Сыромятников НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Концепция нейтронного рефлектометра ЛИРА с зеркальным отклонителем пучка для исследования жидких систем.
Т.А. Черемных НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина	Метод сингулярного разложения в анализе структурной кинетики формирования пресинаптического комплекса белка ResA по данным времяразрешенного малоуглового рентгено вского рассеяния.
О.В. Юркевич БФУ им. И. Канта, Калининград	Исследование малоуглового рассеяния пористых структур мембран анодированного оксида алюминия, модифицированных методом атомно-слоевого осаждения.
Е.В. Яковенко НИЦ «Курчатовский институт», Москва	Установка ультрамалоуглового рассеяния на реакторе ИР-8.





**СБОРНИК
ТЕЗИСОВ**



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



**Сессия I.
Магнетизм
и малоугловая дифракция.**

Председатель: С.В. Григорьев



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Как узнать распределение намагниченности в трёхмерной периодической ферромагнитной мезоструктуре?

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

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

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

В настоящее время существует множество методов, позволяющих определять магнитную структуру разной сложности, однако для трёхмерных мезосистем, проблема понимания распределения намагниченности всё ещё актуальна. Нахождение её решения становится важным ввиду стремительного роста количества таких систем и расширения возможных областей их применения.

В качестве примера такого объекта можно рассмотреть инвертированную опалоподобную структуру (ИОПС). Для ИОПС было предложено феноменологическое описание процесса намагничивания на основе концепции аналога «правила льда» для наносистем. В рамках такого подхода ИОПС рассматривалась как трёхмерный мезоструктурированный спиновый лёд [1]. Магнитная структура в этом случае представляет собой совокупность изингоподобных векторов намагниченности, направленных вдоль «ножек»-перемычек, соединяющих кубические и тетрадрические мезоэлементы ИОПС. Каждая «ножка» направлена вдоль одной из осей $\langle 111 \rangle$ гранецентрированной кубической (ГЦК) решётки, характерной для упорядочения мезоэлементов ИОПС. «Правило льда» для такой структуры гласит, что количество векторов намагниченности «входящих» в куб или тетраэдр должно быть равно количеству «выходящих» векторов.

Распределение намагниченности определяется соотношением влияния внешнего магнитного поля и «правила льда». Можно выделить три случая: «конкуренция», когда энергетический минимум для «правила льда» не совпадает с минимумом Зеемановской энергии; «независимость», когда поле не влияет на перпендикулярные ему вектора намагниченности, но их поведение строго детерминировано благодаря «правилу льда»; «сотрудничество», когда и магнитное поле, и «правило льда» стремятся привести систему в одно и то же состояние. Эти случаи практически полностью охватывают возможные сценарии эволюции магнитной структуры. Феноменологический подход позволяет предположить вид состояний, через которые пройдет система в ходе намагничивания, однако восстановить полную картину смены состояний чрезвычайно сложно.

Метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) является мощным инструментом исследования магнитных структур мезомасштаба [2,3], но интерпретация экспериментальных данных зачастую является нетривиальной. По этой причине, необходимо дополнительно использовать и другие методики



исследования магнитных свойств. Основная проблема, с которой приходится столкнуться в этом случае – то, что получаемая информация либо поверхностная (магнитно-силовая или Лоренцевская микроскопия), либо интегральная (СКВИД-магнитометрия), а значит, мало помогает в понимании трёхмерной магнитной структуры.

Для однозначного понимания результатов эксперимента МУРН, мы предлагаем производить расчёт магнитного форм-фактора, определяемого распределением намагниченности в образце, и определяющего интенсивность рассеяния нейтронов. Наиболее строгим и прямым методом для определения распределения намагниченности является решение микромагнитных уравнений [4]. Очевидным преимуществом данного метода является отсутствие подгоночных параметров, поскольку искомое распределение намагниченности определяется только характеристиками материала и геометрическими параметрами системы.

Мы опробовали такой подход для всех трёх случаев намагничивания ИОПС, упомянутых выше, и получили хорошее соответствие между расчётными и экспериментальными результатами.

Авторы благодарят Андре Хайнемана и Свена-Арне Зигфрида (Meier-Leibnitz Zentrum) за неоценимую помощь при постановке эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов. Микромагнитное моделирование было проведено в Вычислительном ресурсном центре Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета. Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № офи_м 14-22-01113).

1. A.A. Mistonov et al., Phys. Rev. B, 87 (2013) 220408.
2. E.G. Iashina et al., J. Synch. Investig., 9 (2015) 655.
3. E. Altynbaev et al., Phys. Rev. B, 94 (2016) 174403.
4. A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism, Clarendon Press, 109 (2000).



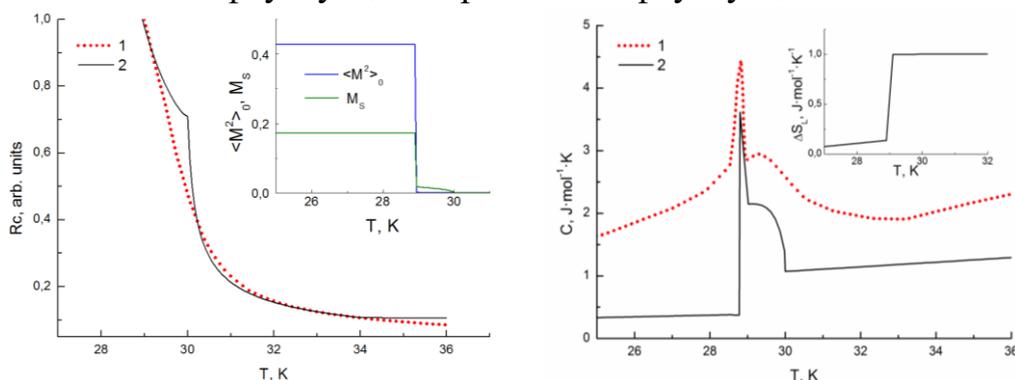
Спиновый ближний порядок и киральные флуктуации в MnSi

Т. А. Ноговицына, А. Г. Волков, А. А. Повзнер

Уральский федеральный университет им. первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

На основе LSDA+U+SO-расчетов электронной структуры и спин-флуктуационной теории построен функционал свободной энергии системы сильно коррелированных электронов MnSi с антисимметричным релятивистским взаимодействием Дзялошинского – Мория. Получены уравнения магнитного состояния, решения которых описывают область геликоидального ферромагнетизма и область киральных флуктуаций локальной намагниченности, которая возникает вследствие исчезновения ферромагнитной оси квантования («катастрофа» модели Янсена-Бака).

Учет нулевых спиновых флуктуаций позволяет согласовать результаты LSDA+U+SO-расчетов с экспериментальными данными о магнитных моментах. При температуре T_c , имеет место резкое подавление нулевых спиновых флуктуаций термодинамическими флуктуациями (кроссовер термодинамического и квантового фазового перехода) и геликоидальный ферромагнетизм исчезает. При этом проведенные расчеты описывают экспериментально наблюдаемые в этой области температур резкие максимумы однородной магнитной восприимчивости и теплоемкости. В области киральных флуктуаций локальной намагниченности радиус спиновых корреляций, изменяется от значения примерно равного периоду геликоидальной спирали (λ) до значения 0.6λ (согласно нейтронографическим данным 0.7λ). Найдена температура исчезновения спинового ближнего порядка с киральными флуктуациями T_s . Показано, что в области $T_c < T < T_s$ на температурной зависимости теплоемкости возникает «плечо», связанное с компенсацией вклада в энтропию тепловых флуктуаций киральными флуктуациями.



Слева: Температурная зависимость радиуса корреляции: 1 – экспериментальные данные [1], 2- расчет в настоящей работе. На вставке: температурная зависимость амплитуды нулевых флуктуаций и намагниченности. Справа: Температурная зависимость теплоемкости: 1- экспериментальные данные [1], 2 – расчет в настоящей работе. На вставке: изменение энтропии локальных магнитных моментов.

1. M. Janoschek, M. Garst, et al., Phys. Rev. B 87, 134407 (2013).
2. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, et al., Phys. Rev. B 81, 144413 (2010).



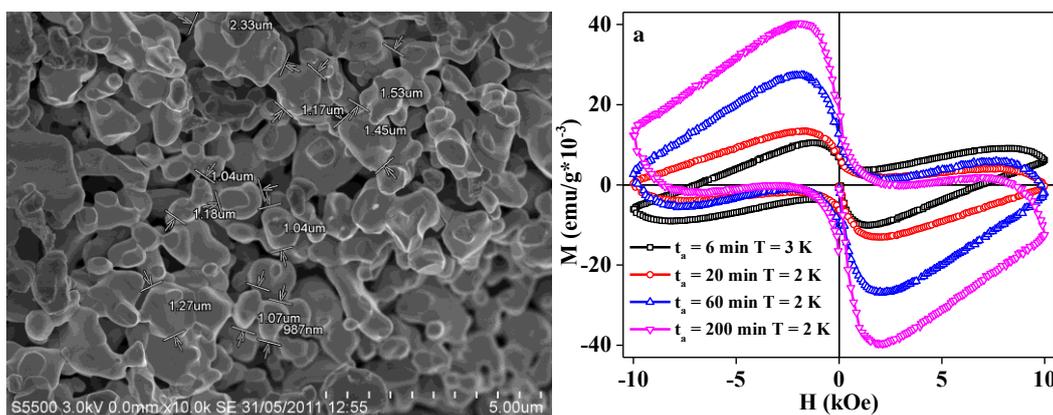
Сверхпроводящие пузыри или сверхпроводимость тонкого слоя на поверхности ВТСП гранул $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$

*А. А. Быков¹, Н. Е. Савицкая¹, Д. М. Гохфельд², С. И. Попков²,
К. Ю. Терентьев²*

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

² Институт физики имени Л.В. Киренского, Красноярск, Россия

Известно [1,2], что основную роль в макроскопическом поведении ВТСП керамик играет мезоструктурные характеристики как то – размер гранул, их форма, изрезанность границы, количество дефектов для пининга, и т.п. Нами синтезированы уникальные ВТСП структуры на основе смеси несверхпроводящих керамик La_2CuO_4 и $\text{La}_{1.56}\text{Sr}_{0.44}\text{CuO}_4$. В результате диффузии Sr на поверхности гранул образовался сверхпроводящий слой оптимально допированного $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ [1] с различной толщиной в зависимости от времени спекания $t_a = 2, 6, 20, 60, 200, 600, 2000, 20000$ min. Проведены исследования намагниченности и сопротивления в зависимости от температуры и магнитного поля. Мезоструктурные характеристики были исследованы сканирующей электронной микроскопией, вычислена фрактальная размерность и перколяционные параметры системы. Показано что время отжига пропорционально объему сверхпроводящей фазы в образце и обратно пропорционально количеству дефектов. С помощью расширенной модели критических состояний вычислены межгранульные критические токи и размеры сверхпроводящих областей в зависимости от времени спекания.



Микрофотография системы с временем спекания 200 минут (слева), показаны так же размеры гранул, справа: $M(H)$ составов LCO-LSCO с различным временем спекания.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-72-10067)

1. Plakida N. High-Temperature Cuprate Superconductors. vol. 166. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2010. doi:10.1007/978-3-642-12633-8.
2. Balaev DA, Popkov SI, Semenov S V, Bykov AA, Sabitova EI, Dubrovskiy AA, et al. Contributions from inter-grain boundaries to the magneto-resistive effect in polycrystalline high-TC superconductors. the underlying reason of different behavior for YBCO and BSCCO systems. J Supercond Nov Magn 2011;24:2129–36. doi:10.1007/s10948-011-1166-9.



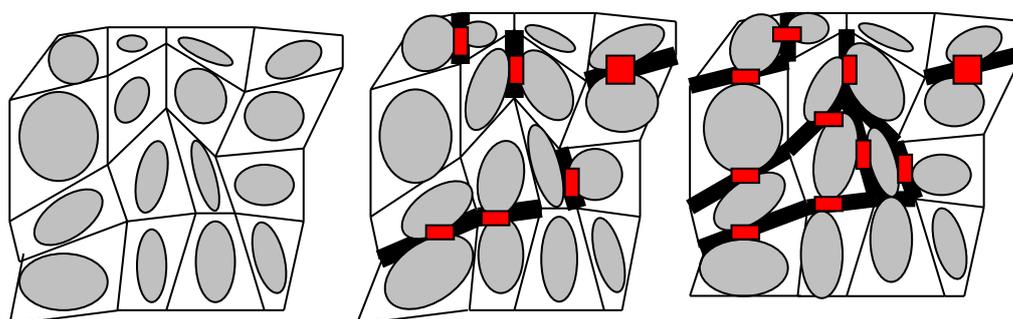
Динамика магнитного потока в перколяционном сверхпроводнике $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$. Математическая модель.

А. А. Быков, Н. Е Савицкая

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

Перколяционные сверхпроводники – это композитные двухфазные системы, в которых сосуществуют протекательные кластеры сверхпроводящей и нормальной фазы. Подобные системы в настоящее время активно исследуются экспериментально в связи с тем, что они обладают достаточно высокими критическими значениями для сверхпроводящих токов, что делает их перспективными для практического применения.

Примером такой структуры может служить смесь несверхпроводящих керамик La_2CuO_4 и $\text{La}_{1.56}\text{Sr}_{0.44}\text{CuO}_4$, в которой при спекании в результате диффузии Sr на поверхности соприкосновения гранул образуется сверхпроводящий слой оптимально допированного $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ [1]. При увеличении времени спекания такого образца объем сверхпроводящей фазы в нем растет, однако, из-за различных размеров гранул, а также наличия в них дефектов, образующиеся сверхпроводящие границы не являются однородными, на них имеются слабые связи. Именно наличие слабых связей – джозефсоновских контактов – определяет основные электромагнитные свойства возникающего перколяционного сверхпроводника, такие как способность пинниговать магнитный поток и, следовательно, величину критического сверхпроводящего тока в ней. Основываясь на данных физических предпосылках, в настоящей работе мы представляем математическую модель двумерного перколяционного сверхпроводника, адекватно отражающую физические свойства реальных систем.



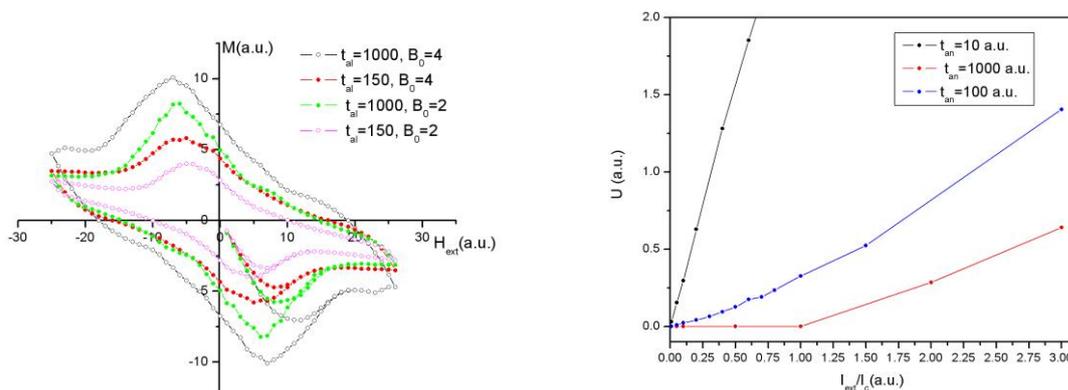
$$t_{an} = 0 \rightarrow t_{an} = T_1 > 0 \rightarrow t_{an} = T_2 > T_1$$

Схема формирования перколяционного сверхпроводника в зависимости от времени спекания образца t_{an} . Серым цветом обозначены несверхпроводящие гранулы, жирные черные линии – формирующаяся на границах их соприкосновения сверхпроводящая фаза, красные прямоугольники – джозефсоновские контакты.



Мы представим исследуемую систему в виде двумерной неупорядоченной решетки джозефсоновских контактов, расположенных на сверхпроводящих границах соприкасающихся несверхпроводящих гранул. При этом мы будем учитывать, что при увеличении времен спекания объем сверхпроводящих границ, а, следовательно, и число джозефсоновских контактов в системе растет. Динамика калибровочно-инвариантной разности фаз на возникающих контактах в такой системе описывается дискретными аналогами уравнений Максвелла [2], модифицированных с учетом наличия или отсутствия сверхпроводящей фазы в данном месте решетки. Данные уравнения позволяют провести компьютерное моделирование динамических процессов в такой системе.

Мы изучили петли намагничивания системы, а также ее вольтамперные характеристики для различных времен спекания образца. Из результатов, представленных на рисунках, мы видим, что при увеличении времени спекания образцов их способность пиннинговать магнитный поток, а, следовательно, и критическое значение для сверхпроводящего тока в них растет, что полностью соответствует экспериментальным данным, полученным для системы $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$, и говорит об адекватности построенной математической модели.



Полученные в результате компьютерного моделирования петли намагничивания (левая панель) и вольтамперные характеристики (правая панель) для различных времен спекания системы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-72-10067)

1. Takashi Uchihashi, Supercond.Sci.Technol., 30 (2017), 013002.
2. С.Л.Гинзбург, А.В.Накин, Н.Е.Савицкая, «Когерентные явления в сверхпроводящем слоистом метаматериале», Письма в ЖЭТФ, вып. 98(4), 225.





**Сессия II. Спиновая
динамика гелимагнетиков
и малоугловое
рассеяние нейтронов.**

Председатель: Н.М. Чубова



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Spin waves in full-polarized state of Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets $Mn_{1-x}Fe_xSi$: small-angle neutron scattering study

*S. Grigoriev^{1,2}, E. Altyntbaev^{1,2}, S.-A. Siegfried³, A. Heinemann³, G. Chaboussant⁴,
K. Pschenichnyi^{1,2}, D. Menzel⁵*

¹ Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre "Kurchatov Institute", Gatchina, Russia

² Saint-Petersburg state university, Saint Petersburg, Russia

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France

⁵ Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany

An archetype compound MnSi is known to order in the helical spin structure below T_C . The substitution of manganese by iron in the isostructural solid solutions $Mn_{1-x}Fe_xSi$ suppresses the helical spin state. The neutron scattering studies together with magnetic data and specific heat measurements discovered a quantum critical point (QCP) corresponding to the suppression of the spin spiral phase with long-range order (LRO) in $Mn_{1-x}Fe_xSi$. This QCP located at $x_{c1} = 0.11 - 0.12$ is, however, hidden by a spin helix short-range order (SRO) appeared below T_{DM} [1]. The critical temperatures T_C and T_{DM} decreases with x and can be extrapolated to 0 at $x = 0.12$ and 0.17, respectively.

We develop the technique to study the spin wave dynamics of the full-polarized state of the Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets by polarized small-angle neutron scattering [2]. We have experimentally proven that the spin waves dispersion in this state has the anisotropic form. We show that the neutron scattering image displays a circle with a certain radius, which is centered at the momentum transfer corresponding to the helix wave vector in helimagnetic phase k_s , which is oriented along the applied magnetic field \mathbf{H} . The radius of this circle is directly related to the spin-wave stiffness of this system. This scattering depends on the neutron polarization showing the one-handed nature of the spin waves in Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets in the full-polarized phase.

We perform the measurements of the spin-wave stiffness A and its temperature dependence for the series of the compounds: MnSi, $Mn_{1-x}Fe_xSi$ with $x = 0.03, 0.06, 0.09, 0.10$. The spin-wave stiffness A for the Fe-doped compounds does not change with temperature up to the critical temperature T_C showing that the criticality originates from the source different from the enhancement of the spin-wave amplitude. In order to reveal the link between the spin-wave stiffness and the critical temperatures, we plotted A of the different $Mn_{1-x}Fe_xSi$ compounds against the critical temperature T_C and against the temperature T_{DM} . It appears that the spin wave stiffness is linearly proportional to the temperature T_{DM} , but not to T_C . This observation implies that the ordering in the system is not trivially determined by the isotropic exchange A but is additionally destabilized by another mechanism. This additional source of the instability can naturally be assigned to the DM interaction, which strength can be roughly estimated via the helix wave vector k .



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

1. V. V. Glushkov, I. I. Lobanova, V. Yu. Ivanov, V. V. Voronov, V. A. Dyadkin, N. M. Chubova, S. V. Grigoriev, and S. V. Demishev, *Phys. Rev. Lett.* 115, 256601 (2015).
2. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, P. Kizhe, and S. V. Maleyev, *Phys. Rev. B* 92, 220415(R) (2015).



Расчёт сечения малоуглового рассеяния нейтронов на спиновых волнах в гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория

К. А. Пшеничный, Е. В. Алтынбаев, С. В. Григорьев

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Получена аналитическая зависимость сечения малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на спиновых волнах в геликоидальных магнетиках, формирующихся благодаря взаимодействию Дзялошинского-Мория в кубических кристаллах без центра инверсии (пространственная группа $R2_13$) [1]. В предположении, что дисперсия спиновых волн в гелимагнетике с волновым вектором \mathbf{k}_s , поляризованном магнитным полем, большим критического поля H_{C2} перехода в ферромагнитную фазу, имеет вид $E_q = A(\bar{q} - \bar{k}_s)^2 + (H - H_{C2})$, показано, что сечение рассеяния нейтронов на двумерной карте углов рассеяния (θ_x, θ_y) представляет собой 2 круга с радиусом θ_C и центрами $\pm\theta_S$, соответствующими брэгговскому углу дифракции на спирали, которая ориентирована вдоль приложенного магнитного поля \mathbf{H} . Радиус этих кругов θ_C непосредственно связан с жесткостью спиновых волн A магнитной системы, и зависит от величины приложенного магнитного поля $\theta_C^2 = \theta_0^2 - \frac{g\mu_B H}{E_n} \theta_0$, где

$\theta_0 = \frac{\hbar^2}{2Am_n}$, E_n и m_n - энергия и масса нейтрона. Показано, что сечение

рассеяния зависит от поляризации нейтронов, демонстрируя киральный характер спиновых волн в гелимагнетиках Дзялошинского-Мория даже в полностью поляризованной фазе. Рассмотрены случаи рассеяния нейтронов на магнонах случаях, когда $\theta_0 \leq \theta_S$, $\theta_S \geq \theta_0$. Случай рассеяния нейтронов на спиновых волнах в гелимагнетике сравнивается с аналогичным рассеянием в ферромагнетике, когда $\theta_S \rightarrow 0$.

1. С. В. Григорьев, Е. В. Алтынбаев, Н. Eckerlebe, А. И. Огороков. Изучение спиновой динамики в ферромагнетике $Fe_{65}Ni_{35}$ методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования 2014, No 10, с. 71–78



Динамические свойства моногерманидов переходных металлов на основе Mn и Fe

*Е. Алтынбаев^{1,2}, S.-A. Siegfried³, P. Strauß⁴, D. Menzel⁴,
A. Heinemann³, Л. Фомичева⁵, А. Цвященко⁵, С. Григорьев^{1,2}*

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

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

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany

⁵ Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия

С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов была исследована температурная эволюция константы жёсткости спиновых волн в образце соединения $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Ge}$ с $x = 0.2$, синтезированного под высоким давлением [1]. Магнитная структура данного соединения упорядочивается в спиновую спираль при температурах $T < T_C = 247$ К с волновым вектором $k = 0.018 \text{ nm}^{-1}$ при низких температурах [2]. Известно, что дисперсионное соотношение для элементарных возбуждений геликоидальной магнитной системы, сформированной за счёт конкуренции основного ферромагнитного обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория, в индуцированной полем ферромагнитной фазе выглядит следующим образом: $E_q = (\mathbf{q}-\mathbf{k})^2 + \Delta H$, где E_q – это энергия волны с волновым вектором \mathbf{q} , \mathbf{k} – волновой вектор магнитной спирали, а ΔH магнитное поле, отчитываемое от критического значения H_{C2} [3]. В результате, рассеяние нейтронов на спиновых волнах будет сконцентрировано внутри области с центром при $\mathbf{q} = \mathbf{k}$, и ограниченной углом отсечки θ_C , зависящем от величины внешнего магнитного поля [4]. Разность между значением внешнего магнитного поля H и величиной поля, необходимого для перехода геликоидального магнетика в индуцированную полем

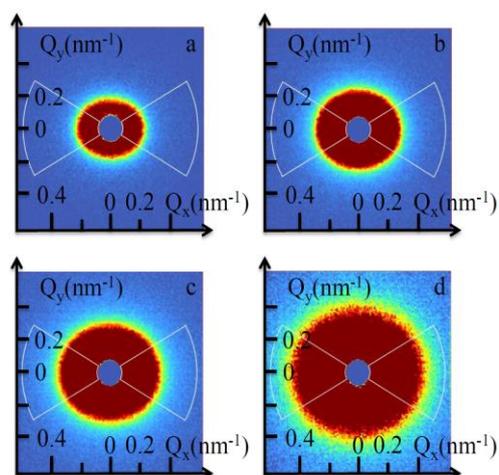


Рис. 1: Карты интенсивностей МУРН, полученных от образца соединения $\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Ge}$ во внешнем магнитном поле $H = 0.6$ Тл при температурах $T = 200$ К (а), $T = 220$ К (б), $T = 230$ К (с) и $T = 240$ К (д). Магнитное поле направлено вдоль оси Q_x .

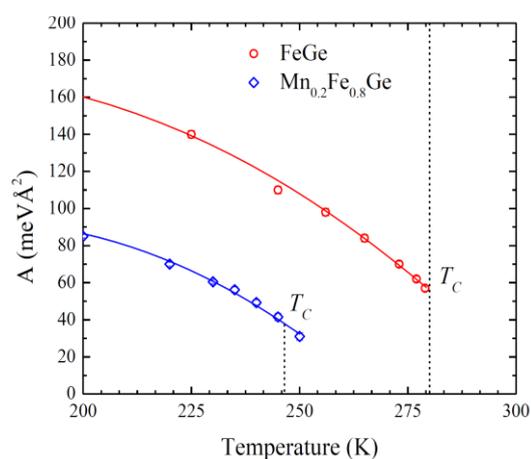


Рис. 2: Температурная зависимость жесткости спиновых волн для соединений FeGe (красные круги) и $\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Ge}$ (синие ромбы).



ферромагнитную фазу, H_{C2} , в данном случае, определяет энергию элементарного возбуждения с волновым вектором $\mathbf{q} = \mathbf{k}$. В результате, в малых полях, $H - H_{C2} \sim 0$, на карте малоуглового рассеяния следует ожидать интенсивный квазиупругий пик с центром при $q = SD/A$ (Рис. 1).

В результате экспериментов, выполненных методом ИММ на малоугловом дифрактометре D11, Гренобль (Франция), было обнаружено, величина волнового вектора магнитной спирали соединения $\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Ge}$ равна $k = 0.018 \text{ nm}^{-1}$ и слабо зависит от температуры. Значения константы спиновой жесткости, полученные в результате исследования соединения $\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Ge}$ различных температурах, показаны на Рис. 2. Для сравнения, на Рис. 2 также представлена температурная зависимость константы жесткости спиновых волн для чистого соединения FeGe [5]. В обоих случаях, жесткость спиновых волн убывает с температурой, но не обращается в ноль при $T = T_C$. Это позволяет охарактеризовать температурный магнитный фазовый переход в этих соединениях как фазовый переход первого рода.

Также были выполнены эксперименты по измерению константы жесткости спиновых волн соединения MnGe . Исследования были проведены на установке по малоугловому рассеянию нейтронов PA-20, LLB, Сакле (Франция). Примеры карт малоуглового рассеяния нейтронов на поликристаллическом образце соединения MnGe при температуре $T = 150 \text{ K}$ при различных значениях внешнего магнитного поля показаны на Рис. 3. Величина магнитного поля, необходимая для перехода магнитной системы MnGe в индуцированное полем ферромагнитное состояние равна $H_{C2} = 1.5 \text{ Тл}$ при температуре $T = 150 \text{ K}$.

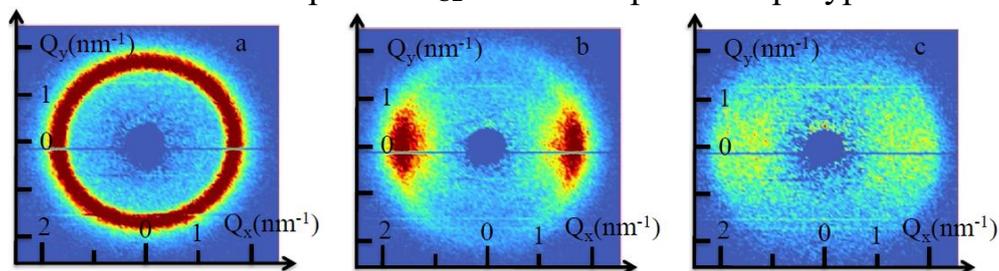


Рис. 3: Карты интенсивностей МУРН, полученных от образца соединения MnGe при температуре $T = 150 \text{ K}$ во внешнем магнитном поле $H = 0 \text{ Тл}$ (a), $H = 2 \text{ Тл}$ (b) и $H = 4 \text{ Тл}$ (c). Магнитное поле направлено вдоль оси Q_x .

Известно, что при наличии в магнитной системе симметричного обменного взаимодействия, формирующего геликоидальную магнитную структуру, в индуцированной полем ферромагнитной фазе дисперсионное соотношение спиновых возбуждений записывается как $\epsilon_q = A(q^2 - k^2)^2 + \Delta H$ [3]. В отличие от случая антисимметричного обмена (случай MnSi и FeGe), данное дисперсионное соотношение не имеет выделенного направления, вдоль которого будет наблюдаться рассеяние. Напротив, следует ожидать, что рассеяние нейтронов будет ограничено внутри некоторого угла отсечки θ_C , который отсчитывается от прямого пучка и практически не зависит от угла между переданным импульсом и направлением внешнего магнитного поля. Как видно из Рис. 1b и Рис. 1c, именно такая ситуация и наблюдается для



соединения MnGe. Зависимость интенсивности рассеяния нейтронов от азимута обусловлена геометрическим фактором рассеяния и, в случае неполяризованных нейтронов, удовлетворяет соотношению $(I_0 + I(\theta)\cos^2(\varphi))$.

Таким образом, можно однозначно утверждать, что геликоидальная спиновая структура соединения MnGe, в отличие от MnSi и FeGe, сформирована за счёт симметричного обменного знакопеременного взаимодействия. Также это позволяет обобщить метод измерения массы магнона для оценки динамических параметров магнитных систем, сформированных за счёт взаимодействия Рудермана-Киттеля-Касуя-Иошиды.

Авторы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (Грант № 17-12-01050).

1. A. V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
2. S.V. Grigoriev, N.M. Potapova, S.-A. Siegfried, V. A. Dyadkin, E. V. Moskvina, V. Dmitriev, D. Menzel, C. D. Dewhurst, D. Chernyshov, R. A. Sadykov, L. N. Fomicheva, and A. V. Tsvyashchenko, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 207201.
3. M. Kataoka, Jour. Phys. Soc. Jap., 56, No 10 3635-3647 (1987).
4. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, P. Kizhe, and S. V. Maleyev Phys. Rev. B 92 220415(R) (2015).
5. S.-A. Siegfried, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, D. Honecker, A. Heinemann, A. V. Tsvyashchenko, and S. V. Grigoriev, Phys. Rev. B 95 (2017) 134415.





**Сессия III.
Слоистые структуры.
Рефлектометрия.**

Председатель: В.В. Тарнавич



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Нейтронная рефлектометрия на интерфейсах с жидкими и мягкими средами на реакторе ИБР-2 ОИЯИ

М. В. Авдеев

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

В современных исследованиях поверхностей и границ раздела на субмикронном уровне все более активно используется рефлектометрия тепловых нейтронов. В этой связи крайне актуальным сегодня является развитие нейтронных рефлектометров с горизонтальной плоскостью образца для экспериментов по рассеянию нейтронов на свободных поверхностях жидких и мягких сред и скрытых межслойных границах типа «твердое тело – жидкость». Так, на импульсном реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна) начаты исследования на новом времяпролетном нейтронном рефлектометре ГРЭИНС данного типа. В докладе представлены результаты первых экспериментов на рефлектометре ГРЭИНС по анализу зеркального отражения и диффузного рассеяния, демонстрирующие возможности прибора в отношении исследований интерфейсов, содержащих коллоидные фазы, включая адсорбционные слои полимеров, и электрохимических интерфейсов с жидкими литийсодержащими электролитами. Обозначены шаги по дальнейшему развитию рефлектометра.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Магнетизм редкоземельных сверхрешеток

Е. А. Кравцов, М. В. Рябухина, В. В. Устинов

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

Магнитные металлические многослойные наноструктуры, образованные чередующимися наноразмерными слоями магнитных металлов – новый класс искусственных материалов, проявляющих уникальные магнитные и магнитотранспортные свойства. Для тяжелых редкоземельных металлов (РЗМ) характерно наличие сложных типов магнитного упорядочения и соответствующих магнитных фазовых переходов в зависимости от внешнего магнитного поля и температуры. В своем докладе мы сообщаем наши последние результаты исследования металлических сверхрешеток РЗМ/РЗМ и РЗМ/переходный металл, в которых мы обнаружили новые явления: структурные и магнитные фазовые переходы как функция толщины слоев и температуры. Неоднородная магнитная структура таких систем сложна для исследования традиционными методами, поэтому мы обсуждаем применение рефлектометрии поляризованных нейтронов для изучения редкоземельных сверхрешеток.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема “Спин” №. 01201463330).



Структурные и магнитные свойства сверхрешеток Fe/Pd/Gd

Н. О. Антропов¹, Е. А. Кравцов¹, Ю. Н. Хайдуков², В. В. Устинов¹.

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

² Max Planck Society Outstation at the FRM-II, Garching, Germany

Сверхрешетки, состоящие из 4f редкоземельных металлов и 3d переходных металлов, представляют большой интерес в физике магнитных явлений и являются актуальной темой для исследования. В данных системах, при приложении внешнего магнитного поля, реализуются сложные магнитные фазовые диаграммы. Магнитные упорядочения в системе возникают из-за конкуренции двух типов магнетизма: локализованного (Gd) и коллективизированного (Fe) [1]. На систему также влияет сильная температурная зависимость магнетизма слоев Gd, в отличие от слабо зависимого Fe. Внедрение парамагнитного слоя Pd, влечет к появлению обменного взаимодействия между соседними ферромагнитными слоями, а также возникает индуцируемый магнитный момент на Pd вблизи интерфейсов [1,2].

Серия многослойных наноструктур Si//Cr(50Å)/[Fe(35Å)/Pd(t)/Gd(50Å)/Pd(t)]x12/Cr(30Å), где t – толщина слоя Pd в системе, была синтезирована методом высоковакуумного магнетронного напыления на постоянном токе на установке MPS_4000_C6 фирмы Ulvac. В качестве подложек использовались монокристаллические пластины Si (001) размером 25×25 мм и толщиной 0.5 мм. Базовое давление остаточных газов в камере напыления металлов было $P=6 \times 10^{-9}$ Па, при напылении ~ 0.1 Па. Скорости напыления элементов: Gd – 65.88 А/мин, Fe – 24.66 А/мин, Pd – 81.76 А/мин, Cr – 31.69 А/мин. Температура роста – 28.6 С⁰

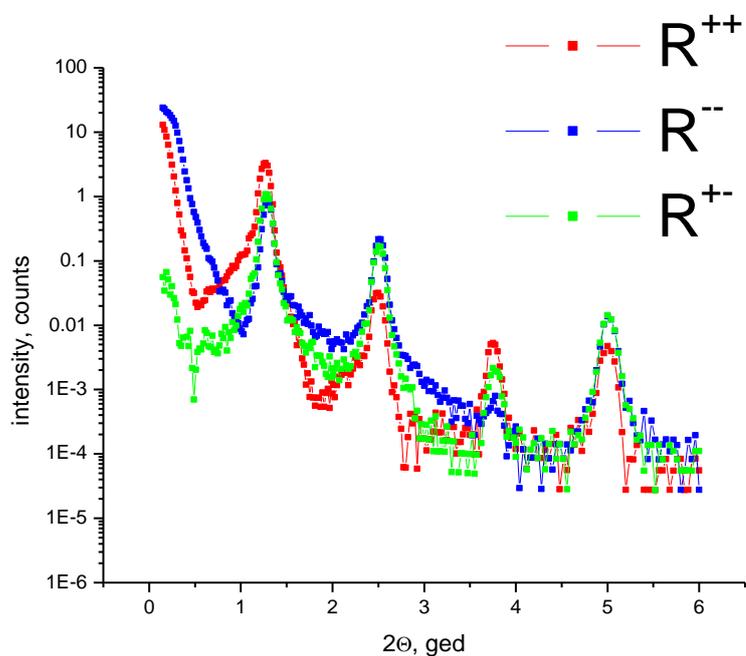
Методом рентгеновской рефлектометрии было подтверждено высокое качество полученных структур, выявлено наличие резких границ между слоями.

Исследование серии сверхрешеток системы Fe/Pd/Gd с различной толщиной слоя Pd в системе методом рефлектометрии поляризованных нейтронов и SQUID магнитометрии показало наличие сложной, неколлинеарной магнитной структуры, зависящей от температуры, величины внешнего магнитного поля и толщины прослойки Pd. На нейтронных спектрах показано наличие большого количества компоненты R⁺. Построенная модель, на основе данных спектров указывает на вращение магнитных моментов Fe и Gd друг относительно друга в определенном интервале значений температуры и внешнего магнитного поля. Максимум эффекта зависит от толщины Pd в системе. При толщине Pd больше 16 Å слои Fe и Gd ориентируются ферромагнитно вдоль приложенного магнитного поля. При толщине Pd меньше 4 Å, когда слой Pd неоднороден, ситуация повторяется, что и в случае с Pd 16 Å. Наличие большого количества магнитных конфигураций, которыми можно управлять посредством изменения температуры и величины внешнего



МУРолец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

магнитного поля, делает сверхрешетки Fe/Pd/Gd очень перспективным объектом исследования.



Спектр рефлектометрии поляризованных нейтронов снятый на образце с толщиной Pd 12 Å при температуре 10К, в магнитном поле 1360 Oe.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект RFMEFI61616X0067).

1. J. Vogel, A. Fontaine, V. Cros, F. Petroff, A. Rogalev, G. Krill, J.-P. Kappler, J. Goulon. // Physical Review B V55, N6, 1997
2. Kravtsov E., Haskel D., S. G. E. te Velthuis, Jiang J. S., and Kirby B. J. // Physical Review B 79, 134438 2009



Экспериментальное уточнение характеристик рассеяния нейтронов опорным слоем гадолиния

Ю. А. Саламатов, Е. С. Никова, Е. А. Кравцов, В. В. Устинов

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

Нейтронная рефлектометрия – удобный и чувствительный метод исследования химического и магнитного строения многослойных металлических наногетероструктур, составляющих базу современной квантовой наноспинтроники. Однако, при обработке экспериментальных данных для сложных систем (например, сверхрешёток с киральным магнитным упорядочением слоёв редкоземельных элементов) возникает проблема неоднозначности полученного решения: невозможно определить, соответствует ли полученный результат реальному строению образца. Одна из причин этого – потеря информации о фазе в нейтронном рефлектометрическом эксперименте.

В предыдущей работе [1] был предложен подход для определения фазы сигнала при помощи опорного слоя из гадолиния. Природный гадолиний содержит два изотопа – Gd^{155} и Gd^{157} , ядра которых резонансно взаимодействуют с нейтронами тепловых энергий [2]. Это приводит к тому, что длина рассеяния гадолиния зависит от длины волны падающих нейтронов, и это свойство используется для расчёта фазы по результатам трёх экспериментов на различных длинах волн.

Данный подход несколько видоизменяется при постановке эксперимента по времяпролётной методике. Рефлектометрические кривые снимаются при трёх различных углах отражения, каждая точка кривой соответствует некоторой длине волны. Для обработки такого эксперимента необходимо точно знать длину рассеяния гадолиния во всём диапазоне длин волн, в котором проводились измерения. При этом теоретические значения [2] могут оказаться не вполне точными для используемого гадолиния (например, вследствие вариаций изотопного состава) и их необходимо уточнить. В данной работе показано, как это можно сделать непосредственно при постановке рефлектометрических экспериментов.

Для определения характеристик рассеяния нейтронов был приготовлен реперный многослойный образец $Si//Cr(100 \text{ \AA})/Gd(5000 \text{ \AA})/Cr(100 \text{ \AA})$. Синтез проводился на установке магнетронного распыления «ULVAC» в Институте физики металлов УрО РАН (г. Екатеринбург). Хром и кремний прозрачны для нейтронного пучка, поэтому образец можно рассматривать, как тонкую плёнку гадолиния, которая и обуславливает поглощение.

На установке РЕФЛЕКС-II реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна) был получен спектр поглощения нейтронов данным образцом. Диапазон длин волн составил 1-6 \AA . Регистрация пучка проводилась на двумерный позиционно-чувствительный гелиевый детектор. Время экспозиции – 125 минут.



Из экспериментальных данных была рассчитана мнимая часть длины рассеяния нейтронов, которая, с другой стороны, может быть представлена по формуле Брейта-Вигнера, как сумма лоренцевских резонансов для каждого изотопа [3]. Экспериментальная кривая была аппроксимирована по этой формуле, параметры резонансов уточнялись многомерным методом Ньютона. Действительно, наблюдается некоторое отличие экспериментальных значений от теоретических (см. таблицу).

Параметр	Эксп. значение	Теор. значение [4]
Энергия резонанса (Gd^{155}), эВ	0,0192	0,0268
Нейтронная ширина (Gd^{155}), эВ	6,84E-05	6,52E-05
Радиационная ширина (Gd^{155}), эВ	0,107	0,108
Содержание изотопа (Gd^{155}), %	14,7	14,8
Энергия резонанса (Gd^{157}), эВ	0,0323	0,0314
Нейтронная ширина (Gd^{157}), эВ	3,06E-04	2,94E-04
Радиационная ширина (Gd^{157}), эВ	0,102	0,106
Содержание изотопа (Gd^{157}), %	15,14	15,65

Зная эти параметры, можно рассчитать зависимость длины рассеяния от длины волны нейтронов в любом необходимом диапазоне длин волн. Таким образом, простой эксперимент позволяет уточнить характеристики рассеяния гадолиния, использованного для синтеза опорного слоя исследуемого образца, и, следовательно, повысить точность обработки данных по нейтронной рефлектометрии.

Работа частично поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (проект № 14.Z50.31.0025) и ФАНО России (тема «Спин», № 0120146330).

1. E.S. Nikova, Yu.A. Salamatov et al., Superlattices and Microstructures. (2017) In press, available online: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.05.013>
2. J.E. Lynn, P.A. Seeger, Atomic Data and Nuclear Data Tables. 191, 44 (1990).
3. S.F. Mughabghab, M. Divadeenam et al., Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross Sections. New York: Academic press. (1981)
4. S.F. Mughabghab. Atlas of Neutron Resonances. Amsterdam: Elsevier. (2006)



Восстановление фазы коэффициента отражения нейтронов в эксперименте с опорным слоем гадолиния

Е. С. Никова, Ю. А. Саламатов, Е. А. Кравцов, В. В. Устинов

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

Изучение многослойных металлических наногетероструктур является весьма актуальной задачей современной физики конденсированного состояния. Рефлектометрия поляризованных нейтронов является одним из самых популярных и удобных из существующих методов, позволяющих исследовать химическое и магнитное строение многослойных тонких плёнок.

Для обработки экспериментальных данных (зависимостей интенсивности отражения от угла падения нейтронов на образец) предложено множество методов, но целесообразно использовать модельно-независимые методы. В данном случае «модель» – это некоторый набор численных параметров, описывающих строение и характеристики образца [1].

Данные методы сводятся к некоторому уравнению, которое связывает коэффициент отражения и потенциал рассеяния, и позволяет приближённо восстановить значимые особенности профиля. Главный недостаток этих методов в том, что они требуют знания коэффициента отражения образца, как комплексной функции, что приводит к потере информации о фазе. Это так называемая фазовая проблема, которая может быть решена с помощью опорного слоя, нанесенного на исследуемый образец и имеющего известные характеристики [2].

Ранее было показано, что гадолиний является подходящим материалом для применения его в качестве опорного слоя для решения фазовой проблемы нейтронной рефлектометрии при исследовании магнитных пленок, т.к. два изотопа гадолиния Gd^{155} и Gd^{157} имеют резонансное поглощение нейтронов. Что приводит к сильной зависимости длины рассеяния гадолиния от длины волны, поэтому возможно провести несколько экспериментов на различных длинах волн (различных углах отражения при времяпролётной методике) [3].

В ходе исследования были рассчитаны три кривые коэффициента отражения при трех различных длинах волн для пленки $Si//Cr(100 \text{ \AA})/Fe(150 \text{ \AA})/Cr(120 \text{ \AA})/Gd(50 \text{ \AA})/V(20 \text{ \AA})$ с опорным слоем Gd (слой V здесь присутствует в качестве защиты от окисления). Из-за наличия слоя Gd на этих кривых видны очевидные различия, благодаря которым был вычислен модуль и фаза комплексного коэффициента отражения для исходной системы, а используя уравнение Гельфанда-Левитана-Марченко, был вычислен потенциал рассеяния [4].

Так же был проведен эксперимент по отражению нейтронов от трехслойной пленки $Si//Cr(300 \text{ \AA})/Fe(300 \text{ \AA})/Cr(200 \text{ \AA})/Gd(50 \text{ \AA})/V(50 \text{ \AA})$. Три кривые коэффициента отражения были получены для трех разных углов с



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

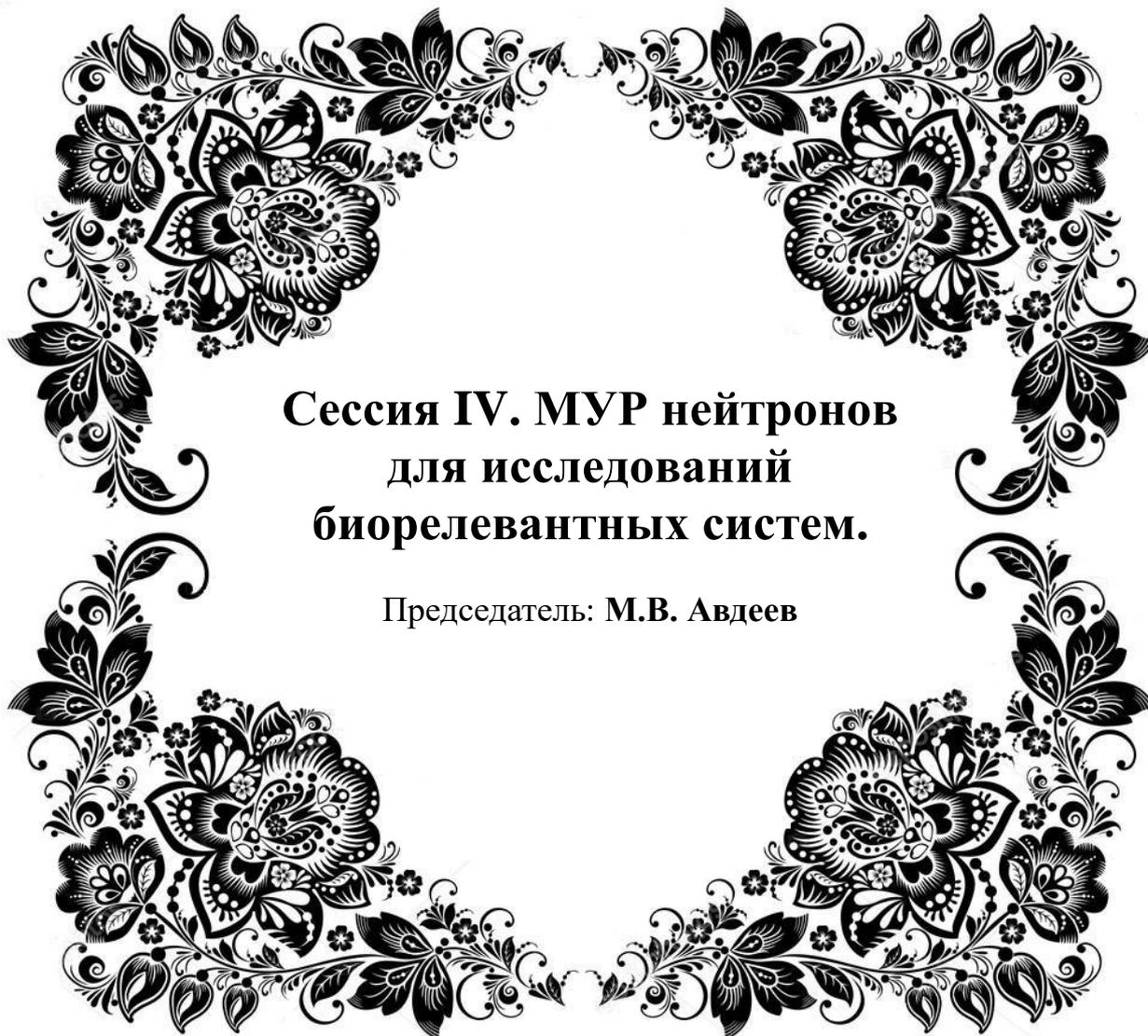
помощью REFLEX-P импульсного реактора ИБР-2 (г. Дубна). По этим данным были рассчитаны модуль и фаза коэффициента отражения.

В настоящее время исследовательские работы по обработке экспериментальных данных для восстановления фазы предложенным методом, а также для проверки условий и пределов применимости метода, продолжаются.

Работа была частично поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (проект 14.Z50.31.0025) и программой FASO Russia (тема «Spin» № 01201463330).

1. E.S. Nikova, Yu.A. Salamatov, E.A. Kravtsov, V.V. Ustinov (2017). Determination of neutron scattering potential of the thin multilayered film with gadolinium reference layer. Superlattices and Microstructures. In press, available online: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.05.013>.
2. Ю.А. Саламатов, Е.А. Кравцов XVI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества. Тезисы докладов, 185, (2015).
3. Yu. A. Salamatov, E. A. Kravtsov, Use of gadolinium as a reference layer for neutron reflectometry, Journal of surface investigation: x-ray, synchrotron and neutron techniques, v. 10, №6, pp. 1169-1172.
4. R. Lipperheide, G. Reiss, H. Leeb, H. Fiedeldey, and S. A. Sofianos, Solution of the inverse scattering problem in specular reflection, Phys. Rev. B, 51 № 16 (1995), p. 11032.





**Сессия IV. МУР нейтронов
для исследований
биорелевантных систем.**

Председатель: М.В. Авдеев



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Структура нанолекарств

М. А. Киселев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Фосфолипиды, извлекаемые из соевого масла (соевые фосфолипиды - essential phospholipids), применяются для создания лекарств под брендом Эссенциале. Эссенциале представляет из себя липосому микронных размеров. Уникальная технология создания нанолекарств на основе соевых фосфолипидов разработана в Институте биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича, Москва.

В докладе представлены результаты исследования серии нанолекарств, разработанных в Институте биомедицинской химии методом малоуглового рассеяния нейтронов на реакторе ИБР-2 (установка ЮМО, Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Московская область) и методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей на синхротронном источнике КИСИ (установка ДИКСИ, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва).

Пять различных нанолекарств (фосфолипидная транспортная система, фосфолипидит, индолип, доксолип, наноарбидол) исследовались методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) при их концентрациях в тяжелой воде 5%, 10%, 25% и температурах 20°C и 37°C. Все нанолекарства имеют везикулярную морфологию. Радиус везикулы, полидисперсность размера, толщина липидного бислоя были определены из кривых МУРН. При концентрациях нанолекарства 25% межвезикулярное взаимодействие учитывалось введением структурного фактора. Результаты показывают, что везикулярная морфология стабильна при изменении температуры. Параметры везикул (радиус, полидисперсность размера, толщина липидного бислоя) для концентрации нанолекарства 25% (фармацевтическая концентрация) близки к параметрам везикул при 5% концентрации нанолекарства в тяжелой воде (наиболее подходящая концентрация для МУРН).

Сравнение результатов нейтронных и синхротронных экспериментов демонстрирует невозможность применения однородного приближения плотности длины рассеяния фотона липидным бислоем для описания экспериментальных данных.

На основе полученных результатов была сформулирована концепция критически малых везикул, как везикул, у которых внутренний радиус близок к значению толщины липидного бислоя. Исследованные нанолекарства разбиваются на два типа. Первый тип (основанный на фосфолипидной транспортной наносистеме) является малыми везикулами с радиусом в три раза большем толщины липидного бислоя. Второй, основанный на фосфолипидите (фосфолипидит, доксолип, наноарбидол) является критически малыми везикулами.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Работа выполнена при финансировании грантом РФФИ 14-12-00516.



New computational method to get D₂O/H₂O contrast from all-atom molecular dynamics trajectories for large biomacromolecular complexes

A. V. Shvetsov^{1,2}, *M. A. Koltsov*^{1,3}, *A. E. Schmidt*¹,
*D. V. Lebedev*¹, *V. V. Isaev-Ivanov*¹

¹ Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia

² Peter the Great Saint-Petersburg polytechnic university, Saint-Petersburg, Russia

³ Saint-Petersburg state university, Saint-Petersburg, Russia

Currently molecular modeling methods are widely used to study various biological systems. This raises the question of the verification of the obtained model using the existing experimental data. In the case of using small-angle neutron scattering methods, verification of the model raises the question about a way to take contrast variation information correctly into account.

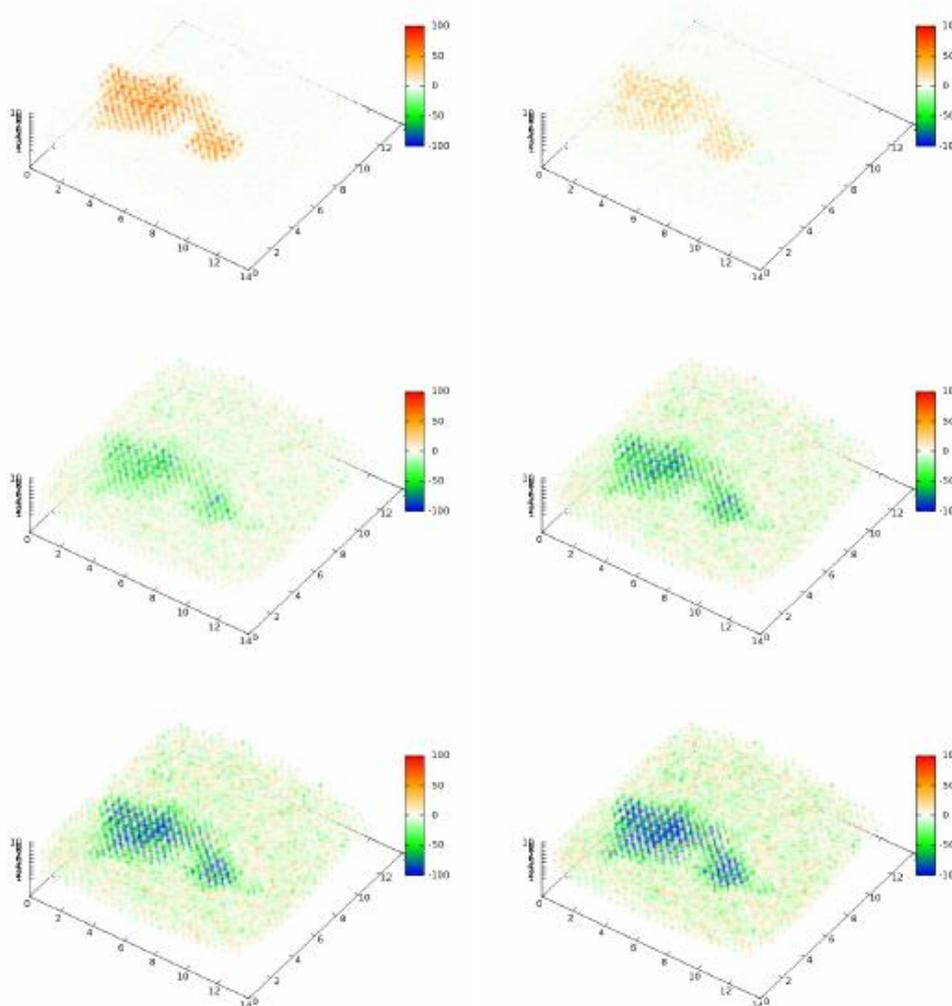


Fig. Scattering length density for glu-coamylase for different D₂O/H₂O contrast (0– top left, 0.235 – top right, 0.646 – middleleft, 0.794 – middle right, 0.992 – bottom left, 0.998 – bottom right)



A method to calculate SANS [1] and NSE [2] curves from MD trajectories was developed and implemented as analysis modules for molecular dynamics software package GROMACS. Previously other groups proposed methods to estimate contrast for small systems such as fatty-acids in organic non-polar solutions [3]. We extended method that was previously developed [1,2] to include D₂O/H₂O contrast estimation directly from molecular dynamics trajectories. Interesting that taking into account D/H exchanges in molecular model plays critical role in model data comparison with experiment, especially for systems containing carbohydrates, and for large biomacromolecular complexes.

1. A.V. Shvetsov et. al. Journal of Surface Investigation X-ray Synchrotron and Neutron Techniques, 6 (2013)
2. A.V. Shvetsov et. al. Computational Materials and Biological Sciences, chapter 2 (2015) ISBN: 978-1-63482-541-2
3. R.A.Eremin et. al. Chemical Physics, 461, 1-10 (2015)



Структура и взаимодействие липидных мембран в присутствии ионов кальция и полярных молекул по данным малоуглового рассеяния

Ю. Е. Горшкова

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Биологическая мембрана (БМ) – структурный элемент клетки, представляющий собой динамичную функциональную поверхность, на которой осуществляются многочисленные биохимические процессы. Основными компонентами БМ являются фосфолипиды, гликолипиды, белки и холестерин, каждый из которых выполняет важную роль в биофизических процессах. Фосфолипидный бислои является структурной основой БМ и выполняет значимую роль в ряде важных физиологических процессов: свертывание крови, проведение нервных импульсов, активация мембранных и лизосомальных ферментов, регенерация тканей, иммунологические реакции, перенос электронов в цепи «дыхательных» ферментов.

Понимание механизма переноса различных молекул через мембраны, выполняющие барьерную функцию, имеет большое значение для многих биологических процессов и является ключевым компонентом в развитии таких технологий, как криосохранение биоматериалов, доставка лекарств и генная терапия. Большинство небольших незаряженных молекул (вода, кислород, ...) свободно диффундируют через мембраны. Транспортировка больших или заряженных молекул, таких как ионы, сахара и аминокислоты, требует активных регуляторных механизмов для быстрого достижения осмотического баланса через плазматические мембраны в ответ на быстрые изменения различных физических и/или химических свойств.

Диметилсульфоксид (ДМСО, C_2H_5SO) - амфифильная молекула, увеличивает проницаемость мембран. ДМСО проявляет анестетический и противовоспалительный эффекты, противовирусную и антибактериальную активность, связывает радионуклиды. ДМСО широко используется в качестве криопротектора. Важнейшей задачей криобиологии является восстановление структуры биологических объектов после их размораживания. Для ряда клеток животного и растительного происхождения ДМСО является токсичным. В связи с чем, нахождение «нового» криопротектора является приоритетной задачей криобиологии и криомедицины. Одним из таких «новых» криопротекторов возможно является диэтилсульфоксид (ДЭСО, $(C_2H_5)_2SO$), обладающий более выраженным гидрофобным эффектом.

В работе дан обзор влияния ионов Ca^{2+} и полярных молекул на фазовые переходы, структуру однослойных (ОСВ) и многослойных (МСВ) везикул, взаимодействие фосфолипидных мембран, обсуждаются основные результаты, полученные из анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН):

- Ионы кальция, как и полярные апротонные растворители, увеличивают температуру основного фазового перехода ФХ мембран. Исчезновение предперехода при мольных долях обоих сульфоксидов ≥ 0.2 свидетельствует о



структуризации гелевой фазы МСВ ДМФХ (1,2-димиристоил-*sn*-глицеро-3-фосфадилхолин).

- Переход МСВ ДМФХ (1.0 мас.%) в «несвязанное» состояние в присутствии ионов Ca^{2+} носит непрерывный характер как в жидкокристаллической (ЖК), так и в гелевой фазах, а сами значения критических концентраций ионов Ca^{2+} , при которых наблюдается обсуждаемый переход зависят как от массовой доли липида в смеси, так и от температурных условий проведения эксперимента: 0.33 и 0.37 мМ в гелевой и ЖК фазах, соответственно, при переходе системы из гелевой в ЖК фазу; 0.56 мМ при переходе из ЖК в гелевую фазу во всех исследуемых фазах.

- Впервые по данным МУРН предложен способ определения константы связывания ионов Ca^{2+} с липидными молекулами: 22 M^{-1} в гелевой и 19 M^{-1} в ЖК фазах; определен ряд физико-химических параметров в области перехода МСВ ДМФХ в «несвязанное» состояние; оценено изменение направления $\text{P}^- - \text{N}^+$ диполя при связывании ионов Ca^{2+} с полярной головой липидных молекул: 15° в ЖК фазе и 20.6° в гелевой фазе.

- Сульфоксиды оказывают существенное влияние на структуру ДМФХ мембран. Взаимодействие ДМСО-липид при $X_{\text{ДМСО}} = 0.2$ связано с полной дегидратацией липидного бислоя. Сравнительный анализ влияния ДЭСО и ДМСО на структуру липидных мембран позволил сделать вывод о значимой роли гидрофобного эффекта, который наиболее выражен в случае ДЭСО.

Одной из важнейших функций БМ является ее способность отделять клетки от внеклеточной среды. Нарушение целостности мембраны приводит к гибели клеток. Однако локальные изменения целостности мембраны в краткосрочном временном масштабе приводят к созданию новых структур путем слияния или деления клеток. Слияние мембран, играет важную роль в физиологических процессах, таких как экзоцитоз, секреция, образование вторичных лизосом. Кроме того, направленное слияние клеток с помощью различных агентов слияния *in vitro* широко используется для решения ряда проблем в области биомедицины и биотехнологии.

В работе представлен анализ слияния ОСВ и МСВ везикул, индуцированного ионами кальция и полярными молекулами ДМСО и ДЭСО. Спонтанные процессы: МСВ \rightarrow ОСВ в присутствии ионов Ca^{2+} , ОСВ \rightarrow МСВ в присутствии сульфоксидов происходят путем слияния ФХ мембран. Показано, что данный процесс, стабильность исходных и образованных систем зависят как от способа приготовления образцов, так и от температурных условий проведения эксперимента. Наиболее стабильной является система сформированных ОСВ ДМФХ в смеси $\text{CaCl}_2 \bullet 2\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ при концентрации ионов кальция более 0.4 мМ. Система, которая возвращается в исходное состояние, испытывая переходы ОСВ \rightarrow МСВ в ЖК фазе и МСВ \rightarrow ОСВ в области фазового перехода при охлаждении, соответствует ОСВ ДМФХ в D_2O при добавлении ДЭСО ($X_{\text{ДЭСО}} = 0.1$) в ЖК фазе.

Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ: № 04-4-1121-2015/2020 при финансовой поддержке сотрудничества ОИЯИ – Румыния (№ 218_9 и № 219_36 от 10.04.2017).



К проблеме надмолекулярной организации целлюлозы *Glucanacetobacter xylinus*

Р. Смыслов,^{1,2} Г. Копица,^{2,3} К. Ездакова,² А. Хрипунов,¹ А. Ткаченко,⁴
V. Pipich,⁵ A. Radulescu,⁵ Ю. Горшкова⁶

¹ Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

³ Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

⁵ JCNS, Forschungszentrum Juelich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany

⁶ Объединённый институт ядерной физики, Дубна, Россия

В последние годы обилие публикаций по целлюлозе *Glucanacetobacter xylinus* (ЦГХ) связано с уникальностью ее надмолекулярной организацией (НМО). ЦГХ предлагают использовать в десятках областей техники. В медицине нано-гель-пленка (НГП) ЦГХ может быть применена в качестве скаффолда – жесткого макромолекулярного каркаса – для формирования взаимопроникающих полимерных сеток композитных гидрогелей при создании искусственного хряща [1].

Правильность схемы НМО ЦГХ, предложенной Brown'ом еще в 1996 году [2] и которую плодотворно использовал Fink [3], должна быть подтверждена всеми возможными современными методами включая метод малоуглового и ультрамалоуглового рассеяния нейтронов (МУРН и УМУРН), а также комплементарный метод МУР рентгеновских лучей (МУРР) [4].

Мы исследовали надмолекулярную структуру нативной НГП ЦГХ, контрастированной с помощью смешенного буфера D_2O / H_2O в соотношении 3 / 2, используя рассеяние нейтронов в «самых» малых углах (по-английски – Very Small Angle Neutron Scattering) для промежуточного диапазона переданных импульсов $10^{-4} < q < 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ на установке KWS-3 в Научном центре Юлиха [5]. Изучение интенсивности рассеяния нейтронов $I_s(q)$ удаётся расширить в область больших q вплоть до 10^{-2} \AA^{-1} за счет варьирования расстояний источник-образец и образец-детектор, соответственно.

Анализ кривых VSANS показал (см. рисунок) наличие двух структурных уровней для нативной НГП бактериальной целлюлозы. При $q_{\max} = 0.00124 \text{ \AA}^{-1}$ на кривых VSANS наблюдают структурный пик, который указывает на присутствие в НГП ближнего порядка с характерным расстоянием $\xi = 2\pi/q_{\max}$, равным ок. 500 нм.

Первый структурный уровень – это ламели. У них прямоугольное сечение с толщиной, характеризуемой радиусом инерции R_{g1} ок. 12 нм, и шириной R_c ок. 140 нм, полученной из ширины пика на кривой VSANS на его полувисоте. Ламели, таким образом, и формируют этот ближний порядок, являющийся границей 1-го и 2-го структурных уровней. Видно, что в области малых q на 2-м структурном уровне (см. рисунок) наблюдают линейные зависимости $I_s(q)$ в



двойном логарифмическом масштабе, причем наклон кривой n_2 ок. 1,95. Т.е. речь идет об объемной фрактальной структуре, которую образуют ламели с длиной гораздо большей, чем 1 мкм.



МУРН для нано-гель-пленки и воздушносухой ЦГХ

Согласно модели Brown'a синтезируемые микрофибриллы имеют размер $(6 \div 10) \cdot (6 \div 10) \text{ nm}^2$ и укладываются в наноленты с поперечным сечением $(6 \div 10) \cdot (30 \div 150) \text{ nm}^2$, причем длина такой наноленты гораздо больше 1 мкм. Используя фрактальное представление о геометрическом самоподобии надмолекулярной структуры в определенном (ограниченном) диапазоне размеров, мы раздвинули рамки этой модели, показав, что на мезоскопическом уровне от нескольких десятков нанометров до нескольких десятков микрон НМО ЦГХ представляет фрактальную сеть с дисперсионным элементом – узлом ячейки сети размера $R_c \approx 140 \text{ nm}$. Этот структурный элемент образует ближний порядок с $\xi \approx 500 \text{ nm}$, создавая ячейку сети. Такая ячейка имеет размер 500 нм нижней границы фрактального диапазона на 2-м структурном уровне. Верхний размер объемного фрактала с фрактальной размерностью полимерной сети $D = n_2$ составляет на основе оценки характерного радиуса сферических объектов $R_{c2} = [(D+2)/D]^{1/2} \cdot R_{g2}$, полученной из области Гинье в малых q (см. рисунок), не менее 3 мкм в диаметре. Сушка на воздухе НГП бактериальной целлюлозы приводит к утрате указанных выше особенностей НМО.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за предоставленный грант № 16-02-00987, в рамках которого выполнялась эта работа.

1. E.V. Velichko, A.L. Buyanov, N.N. Saprykina, Yu.O. Chetverikov, С.P. Duif, W.G. Bouwman, R.Yu. Smyslov, European Polymer Journal 88, 269–279 (2017). DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2017.01.034>
2. R.M. Brown, Jr., J. Macromol. Sci. A. 33, 1345–73 (1996).
3. H.-P. Fink, H. J. Purz, A. Bohn, and J. Kunze, Macromol. Symp. 120, 207–217 (1997).
4. M. Martinez-Sanz, M. Gidley and E. P. Gilbert, Soft Matter (2015). DOI: 10.1039/C5SM02085A
5. Goerigk G., Varga Z. // J Appl Crystallogr 44, 337–342 (2011).





**Сессия V. Фрактальная
концепция в исследованиях
конденсированного
состояния.**

Председатель: В.В. Рунов



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Исследование шелка методами рассеяния *in situ*

И. А. Краснов

*Institute for Experimental and Applied Physics Christian-Albrechts-University of Kiel,
Kiel, Germany*

Естественный шелк, производимый в природе как пауками, так и шелкопрядными личинками (например, *Bombyx mori*), обладает экстраординарными свойствами, демонстрируя комбинацию высокой механической сопротивляемости с большой растяжимостью, обладая при этом малой плотностью. Шелк превосходит по этим параметрам искусственные материалы, что делает его интересным объектом для исследования. Шелк является полукристаллическим нано-композитным материалом, содержащим фиброиновые (β - sheet) кристаллиты, встроенные в мягкую аморфную матрицу.

Целью нашей работы было исследование свойств шелка методом совмещения механических (реологических) экспериментов с *in situ* экспериментами по рассеиванию синхротронного излучения и нейтронов. Если результаты измерений с рассеянием на большой угол позволяют получить информацию о структуре материала (в основном поликристаллов), находящегося под механическим воздействием, то малоугловое рассеяние нейтронов (МУР) позволяет получать информацию о материале на мезоскопическом уровне. При этом дейтерирование образцов исследования позволило разделить сигнал от аморфной матрицы и сигнал от кристаллитов, в нее встроенных. Дополнительно информация об аморфной части материала была получена при помощи экспериментов по динамическому рассеянию нейтронов (QENS), что дало возможность исследовать релаксационные молекулярные процессы в шелке при растяжении.



Анализ малоуглового рассеяния стохастическими массовыми фракталами

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

В работе рассматриваются существующие теоретические модели описания рассеяния излучения (нейтроны, фотоны) наноразмерными фрактальными агрегатами [1-9]. Показано, что ни одна из них не описывает в достаточной мере как форм-фактор рассеяния модельными агрегатами, так и экспериментальные кривые малоуглового рассеяния нейтронов (напр., кластерами детонационных наноалмазов), в полном диапазоне фрактальных размерностей связных множеств, $D = (1-3)$. Причиной этого видится некорректный учет эффектов обрыва корреляционной функции плотность-плотность. Фактически в расчетах это приводит не только к изменению интервала степенного рассеяния в малоугловых спектрах, но и амплитуды степенного рассеяния (множителя при q^{-D}).

Для описания экспериментальных и расчетных спектров с одной стороны предлагаются физически обоснованные поправки к некоторым существующим моделям, а с другой стороны показывается недопустимость использования ряда других моделей, в частности, из-за нефизического поведения рассеяния на пределе $D \rightarrow 3$. Полученные результаты используются при описании малоуглового рассеяния актуальными наносистемами.

1. M. E. Fisher, R. J. Burford, Phys. Rev. A 156, 583 (1967).
2. T. Freltoft, J. K. Kjems, S. K. Sinha, Phys. Rev. B 33, 269 (1986).
3. J. Teixeira, J Appl. Cryst. 21, 781 (1988).
4. M. Y. Lin, H. M. Lindsay, D. A. Weitz, et al., Phys. Rev. A 41, 2005 (1990).
5. R. A. Dobbins, C. M. Megaridis, Appl. Optics 30, 4747 (1991).
6. C. M. Sorensen, J. Cai, N. Lu, Langmuir 8, 2064 (1992).
7. G. Beaucage, J. Appl. Cryst. 29, 134 (1996).
8. C. M. Sorensen, Aerosol Sci. Tech. 35:2, 648 (2001).
9. B. Hammouda, J. Appl. Cryst. 43, 1474 (2010).



Моделирование распространения волнового фронта в рамках скалярной теории дифракции

Н. В. Петров

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

В докладе будет представлен программный модуль для численного моделирования разнообразных дифракционных явлений, связанных с распространением волнового фронта в свободном пространстве. В основе программного модуля, реализованного в виде виртуального прибора в среде графического программирования National Instruments LabVIEW 8.5, лежит математический аппарат скалярной теории дифракции. Чтобы удовлетворить пределам применимости численных методов расчета дифракционного распространения волновых фронтов в ближней и дальней зоне дифракции используются метод распространения углового спектра плоских волн и метод свертки исходного поля с импульсным откликом системы [1]. Планируется кратко продемонстрировать возможности программного модуля проводить виртуальные дифракционные опыты, такие как дифракция на простейших апертурах, произвольных амплитудных, чисто фазовых и амплитудно-фазовых объектах, формирование спекл-структур, формирование различных волновых полей дифракционными оптическими элементами, в том числе вихревых и сферических. Также имеется возможность воспроизвести классические оптические дифракционные опыты, такие как формирование пятна Араго-Пуассона, опыт Юнга и др.

1. Н.В. Петров, И.А. Шевкунов, О.В. Андреева, Б.Г. Манухин, А.А. Дроздов. ОСНОВЫ ОПТОИНФОРМАТИКИ Методические материалы к лабораторному практикуму «Методы цифровой голографии для задач оптоинформатики». Университет ИТМО, 2014 г., 53 стр.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.





**Сессия VI. МУР нейтронов
для исследований
в области химии
и материаловедения.**

Председатель: Ю.Е. Горшкова



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Особенности строения изотропных и анизотропных протонопроводящих мембран

Ю. В. Кульвелис¹, С. С. Иванчев², О. Н. Примаченко², В. Т. Лебедев^{2, 1},
А. И. Куклин³

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

² Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Исследования последних лет показали, что перфторированные мембраны для водородных топливных элементов можно ранжировать по их эксплуатационным свойствам в зависимости от строения их боковых цепей. Мембраны Nafion® с длинными боковыми цепями (long side chains, LSC) рассматривались в качестве наиболее эффективных мембран с 1972 года, однако несколько лет назад начались активные исследования мембран типа Aquivion® с короткими боковыми цепями (short side chains, SSC). Мембраны SSC достигают большей протонной проводимости, которая сохраняется при высоких температурах, в то время как мембраны LSC теряют проводимость при нагревании выше 90°C. Возможность работы на высоких температурах, ~ 130°C, также позволяет использовать менее чистое водородное топливо (с примесями CO), что приводило бы к быстрому загрязнению катализатора в топливной ячейке при работе на низких температурах.

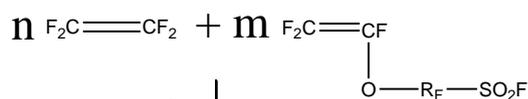
Протонная проводимость мембран SSC, как и LSC, зависит от их состава и количества удерживаемой воды. Исследование влияния структурных характеристик полимера на его макроскопические свойства, такие как протонная проводимость, будет способствовать установлению механизма работы мембран и приведет к созданию мембран следующего поколения, с наиболее оптимальными свойствами [1-2].

В настоящей работе исследованы мембраны SSC, дополнительно модифицированные ориентационной вытяжкой для увеличения их протонной проводимости. Растяжение мембран приводит к изменению строения системы протонопроводящих каналов в полимерной матрице, делая каналы более прямыми в направлении растяжения, что облегчает пути следования протонов.

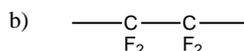
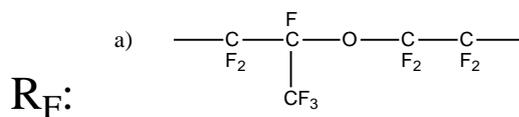
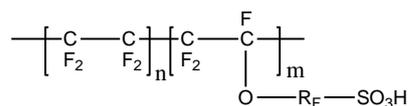
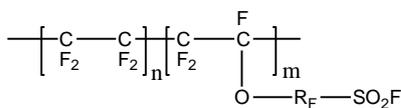
По данным малоуглового рассеяния нейтронов растяжение приводит появлению анизотропии в структуре мембран: сближению соседних каналов, изменению степени кристалличности и других характеристик в разной степени по разным направлениям и в зависимости от молекулярной массы и эквивалентной массы мембран. Эти изменения сопровождаются увеличением протонной проводимости в направлении вытяжки, что делает мембраны более эффективными для работы в топливных элементах.



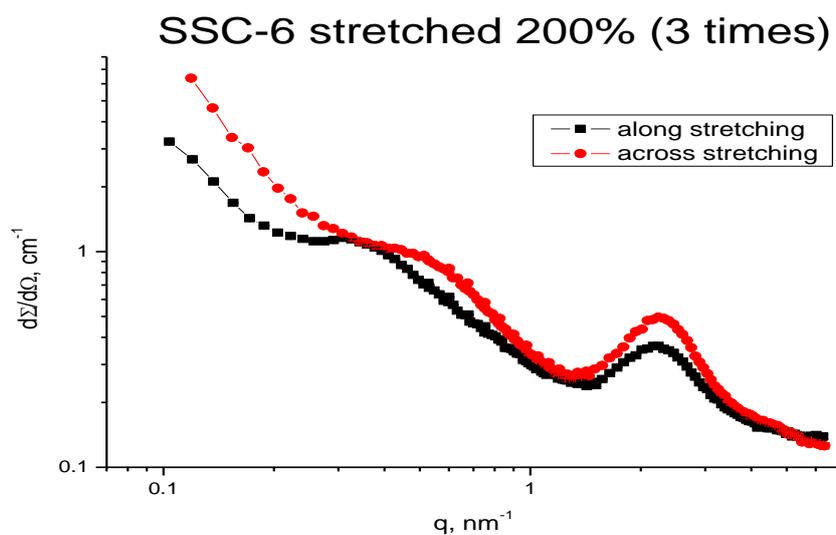
МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



40-60°C



Синтез и строение мембран: a) LSC, b) SSC.



Кривые малоуглового рассеяния нейтронов на растянутом образце вдоль и поперек вытяжки

Благодарим сотрудников Лаборатории нейтронной физики им. Франка ОИЯИ (Дубна) и Лаборатории Леона Бриллюэна (Сакле, Франция) за предоставленное экспериментальное время на малоугловых нейтронных установках.

1. Yu. V. Kulvelis, S. S. Ivanchev, et al., RSC Advances. 73820, 5 (2015).
2. Yu. V. Kulvelis, S. S. Ivanchev, et al., RSC Advances. 108864, 6 (2016).



Многоуровневые структуры фуллеренолов и металлофуллеренолов в водных растворах по результатам нейтронных и рентгеновских экспериментов

М. В. Суясова¹, В. Т. Лебедев¹, В. П. Седов¹, А. И. Куклин², О. А. Кизима^{2,3}

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

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

Фундаментальный и прикладной интерес к фуллеренолам обусловлен их необычным химическим строением, разнообразием физико-химических свойств, и, как следствие, потенциалом применений в технологиях функциональных материалов – от сорбентов до носителей лекарственных препаратов. Как показал ряд экспериментов [1], различные производные эндометаллофуллеренов гадолиния могут быть эффективными контрастирующими агентами, во много раз превосходящими по своим свойствам коммерческие аналоги.

Исследования указанных объектов ведутся на протяжении последних 30-ти лет и сконцентрированы, преимущественно, на исходных металлофуллеренах и гидроксипроизводных пустых фуллеренов. Вопросы, связанные с механизмом упорядочения гидроксипроизводных металлофуллеренов в водных системах, остаются слабо изученными, что связано со сложностями синтеза и ограниченным количеством получаемых соединений. Вместе с тем, постановка биомедицинских задач невозможна без детального анализа поведения ЭМФ и производных в условиях, приближенных к живому организму, т.е. в водных (физиологических). Учитывая общие тенденции кластеризации фуллеренов и фуллеренолов в растворах [2], анализ их поведения в среде живых организмов включает в качестве ключевого момента - изучение устойчивости водных растворов фуллеренолов РЗЭ, особенностей их агрегации.

Указанные проблемы послужили мотивацией работы - синтезировать и системно исследовать механизмы упорядочения металлоуглеродных эндодральных комплексов с 4f-элементами и их водорастворимых производных в растворах в зависимости от атомного номера, размера и электронных свойств инкапсулируемого атома в условиях изменения концентрации, рН среды и температуры в сравнении с явлениями упорядочения пустых фуллеренолов.

В качестве объектов исследования были выбраны фуллеренолы $C_{60}(OH)_{30}$, $C_{70}(OH)_{30}$, а также водорастворимые формы эндофуллеренов 4f-элементов $M@C_n(OH)_{38-40}$ ($M=Pr, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Tm$) в составе молекулярных смесей. В них на долю $M@C_n(OH)_{38-40}$ приходилось в среднем $\sim 80\%$ масс. В остатке были пустые фуллеренолы $C_n(OH)_{38-40}$, среди которых молекулы



$C_{60}(OH)_{38-40}$ составляли ~ 80 % масс. Полученные образцы содержали 5–10 % масс. металла.

Идентификация полученных соединений была проведена методами высокоэффективной жидкостной хроматографии, УФ-, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии, вискозиметрии и др. Методами рассеяния нейтронного и синхротронного излучения изучено упорядочение и охарактеризованы формы структурирования гидроксипроизводных эндофуллеренов 4f-элементов в водных растворах. Малоугловые эксперименты проводились на установке «Мембрана-2» (НИЦ КИ - ПИЯФ, $\lambda = 0.3$ нм, $\Delta\lambda/\lambda = 0.25$), спектрометре «ЮМО» (ОИЯИ, Дубна, $\lambda = 0.05-0.8$ нм), а также на накопительном кольце PETRA III (beamline P12) синхротрона DESY (Гамбург, Германия).

Установлено, что гидродинамические свойства фуллеренолов $C_{60}(OH)_{30}$, $C_{70}(OH)_{30}$ и эндофуллеренолов лантаноидов в водных средах подобны. Для всех систем характерна трехуровневая организация. Первый уровень представлен молекулярными группами (числа агрегации $m_1 \leq 10$) радиусом ~ 1 нм, объединенными в агрегаты размерами $\sim 5-10$ нм (второй уровень), которые упорядочены в пространстве на характерных расстояниях $\sim 40-70$ нм (третий уровень). В опытах с вариацией внешних параметров систем (температуры, pH) показано, что переход от нейтральной среды к кислой (pH = 7, pH = 3) вызывает усиление агрегации фуллеренолов для всех типов инкапсулированных атомов, тогда как изменение температуры (20, 37 °С) не оказывает существенного влияния на структурирование водных растворов.

Из анализа данных установлено: числа и масштабы первичной агрегации молекул связаны степенным законом $m_1 \sim R_1^{Df}$, характерным для разветвленных фрактальных структур, а величины m_1 и R_1 зависят от электроотрицательности и размера инкапсулированных атомов РЗЭ.

Полученные результаты дают развернутое представление о структуре ансамблей металлофуллеренолов РЗЭ в водных растворах в зависимости от температуры и кислотности среды в широком диапазоне молекулярных концентраций (0,05–3 % масс.), в том числе в условиях, приближенных к таковым в живых организмах. Информация о гидродинамическом поведении гидроксипроизводных эндофуллеренов является практически важной, т.к. эти вещества рассматриваются в качестве базовых компонент контрастирующих агентов для магнитно-резонансной диагностики и новых терапевтических препаратов.

1. М. А. Shevtsov, В. Р. Nikolaev, et al., J. App. Mag. Resonance. 45, 4 (2014).
2. М.В. Суясова, Ю.В. Кульвелис, и др., ЖПХ. 88 ,11. 2015.



Структурные характеристики кластерообразования фуллеренов в смеси полярный / неполярный растворитель

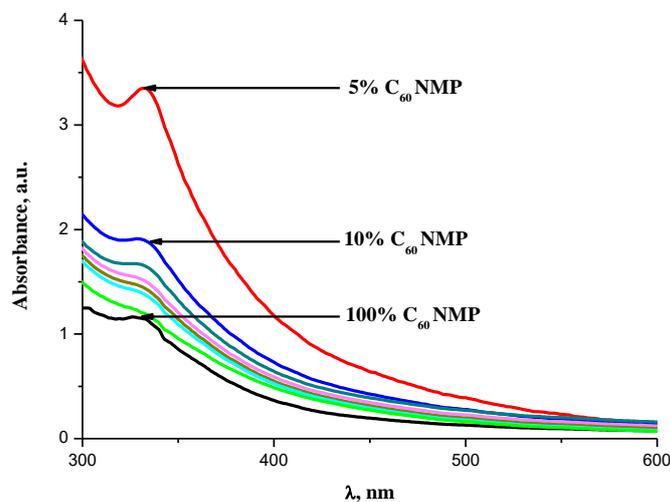
Т. В. Нагорная^{1,2}, Д. Худоба^{1,3}, О. А. Кизима^{1,2}, Л. А. Булавин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Университет им. Адама Мицкевича, Познань, Польша

В настоящее время активно изучаются возможности применений фуллеренов в различных областях, включая электронику, оптику, косметологию и фармацевтику [1, 2]. В немалой степени этому способствовало наличие растворимости данного вида молекул в органических растворителях. За последнюю декаду также был разработан ряд методов получения водных растворов фуллерена на основе неполярных органических растворителей [3], что значительно увеличило перспективность использования фуллеренов в медицине [4]. В отличие от прочих полярных растворителей, N-метил-2-пирролидон (НМП) имеет высокую растворимость фуллеренов (0.89 мг/мл для фуллерена C₆₀) и также смешивается с водой. Процессы кластеризации фуллеренов в азот-содержащих растворителях связаны с особенностями их взаимодействия [5]. Эти смеси характеризуются эволюцией их ультрафиолетовых, инфракрасных и рамановских спектров.



УФ-Вид спектр системы C₆₀ / НМП / толуол при разных объемных долях стартового раствора. Все кривые нормированы на концентрацию фуллерена

Понимание процессов взаимодействия между молекулами фуллерена и растворителя поможет прояснить возможности переноса фуллеренов в водную среду для дальнейшего применения в медицинских целях. Настоящая работа посвящена исследованию кластеризации фуллеренов в смеси НМП / толуол методами малоуглового рентгеновского рассеяния, динамического светорассеяния и УФ-Вид спектроскопии.



1. L. Wang , J. Phys. Chem. Solids. 85, 84 (2015).
2. M. Xing, R.Wang, et.al., Int. J. Refrigeration. 398, 40 (2014).
3. A.O. Khokhryakov, M.V. Avdeev, et. al., Cryst. Rep. 487, 52(3) (2007).
4. Yu.I. Prylutskyu, M.P.Evstigneev, et. al., J. Nanopart. Res. 45, 17 (2015).
5. T.V. Nagorna, O.A. Kyzyma et.al., J. Mol. Liq. 111, 235 (2017).



Прямые и обращенные мицеллы полимеризующихся мономеров в водных и водно-диоксановых растворах по данным рассеяния нейтронов

В. Т. Лебедев¹, Ю. В. Кульвелис¹, А. Ю. Билибин²,
И. М. Зорин², Т. М. Щербинина²

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

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

Для создания упорядоченных полимеров путем структурирования мономеров в растворах и полимеризации их образований, таких как сферические и цилиндрические, прямые и обратные мицеллы поверхностно-активных мономеров [1,2], важно знать механизмы самоорганизации мономеров в зависимости от концентрации раствора и полярности среды.

С помощью рассеяния нейтронов изучен мономер (n-додециламмоний 2-акриламидо-2-метилпропан сульфонат), тяжелой воде при концентрациях $C = 0.005-0.25$ моль/л, включая нижнюю критическую точку образования мицелл, $C^* \approx 0.01$ моль/л. В разбавленных системах ($C < C^*$) наблюдали прекурсоры, в более концентрированных ($C > C^*$) - сферические мицеллы (~100 молекул) радиусом $R_m \sim 2.5-2.8$ нм близким к длине мономера $L_m \approx 2.4$ нм. Из импульсных зависимостей сечений растворов $\sigma(q)$ восстанавливали распределения расстояний $G(R) = R^2\gamma(R)$ между центрами рассеяния (мономерами, их фрагментами) (Рис.), заданные функциями парных корреляций

$$\gamma(R) = (\Delta K V_1)^2 \langle \Delta n(0) \Delta n(R) \rangle = (1/2\pi)^3 \int \sigma(q) [\sin(qR)/(qR)] 4\pi q^2 dq, \quad (1)$$

где V_1 – объем, приходящийся на молекулярную группу в цепи мономера с фактором контраста в растворе ΔK ; $\Delta n(0)$, $\Delta n(R)$ – отклонения численной концентрации молекулярных групп в точках, разделенных расстоянием R , от среднего значения $n(R)$ по образцу.

Ниже критической точки ($C < C^*$) максимумы $G(R)$ при $R^* \sim 1$ нм, $R^{**} \sim 5$ нм (Рис. а,б) показывают присутствие частиц с радиусами инерции $r_{GA} = R^*$ и $R_{GB} = R^{**}$ масштаба мономера и выше, что описываются суммой функций

$$G(R) = A \cdot R \cdot \exp(-R^2/2r_{GA}^2) + B \cdot R \cdot \exp(-R^2/2R_{GB}^2) \quad (2)$$

с коэффициентами A и B , характеризующими рассеивающую способность частиц. Малые частицы, имеющие радиус инерции $r_{GA} = 0.96 \pm 0.21$ нм, $r_{GB} = 0.99 \pm 0.08$ нм, больше, чем у мономера, $r_{GP} = [r_m^2/2 + L_m^2/12]^{1/2} \approx 0.7$ нм (цилиндра радиусом $r_m \approx 0.3$ нм, длиной $L_m \approx 2.4$ нм), представляют собой «димеры» с обращенными в раствор полярными группами и перекрывающимися гидрофобными фрагментами. Крупные, но разреженные объекты масштаба $\sim R_{GB} \approx 5$ нм с числами агрегации $n_B = 18.1 \pm 5.5$, $n_B = 16.2 \pm 5.5$ ($C = 0.005$; 0.008 моль/л) способны конденсироваться, взаимодействуя выше критической точки ($C > C^*$). В результате их плотность



возрастает на два порядка, и они превращаются компактные мицеллы, что проявляется в слиянии пиков $G(R)$ в единый максимум (Рис.1в), который описывается функцией

$$G(R) = V_m \cdot R \cdot \exp(-R^2/2 R_{Gm}^2). \quad (3)$$

Значение радиуса инерции $R_{Gm} = 1.71 \pm 0.04$ нм, отвечающее сфере радиусом $R_m = (5/3)^{1/2} R_{Gm} \approx 2.2$ нм близким к длине мономера, свидетельствует об образовании сферических мицелл.

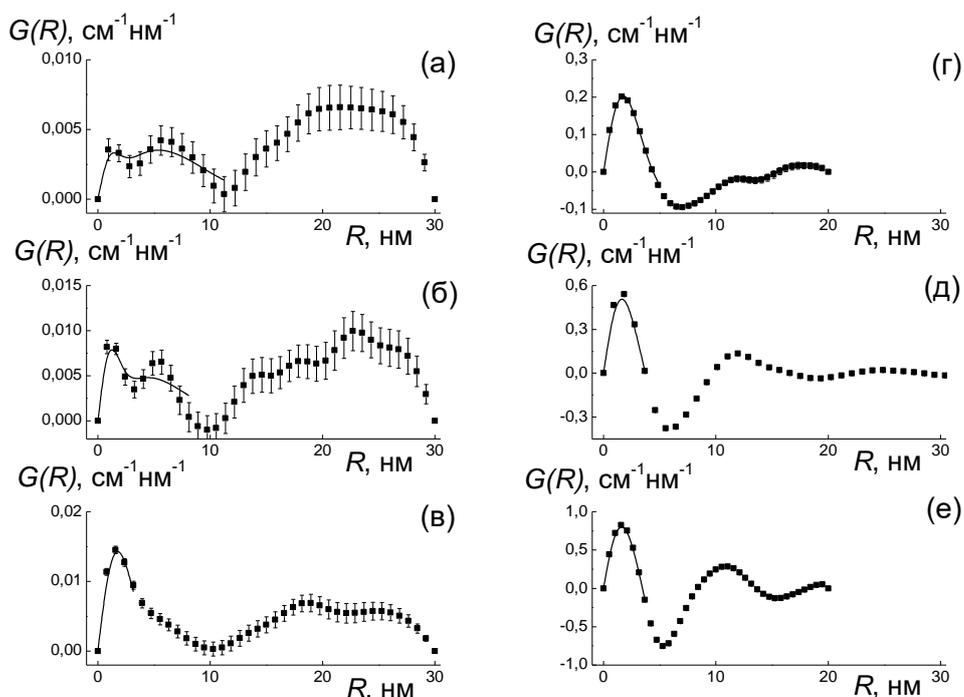


Рис. Спектры $G(R)$ для растворов с долями мономера 0.005; 0.008; 0.010; 0.051; 0.153; 0.255 моль/л (а - е) и кривые аппроксимации (2,3).

Данные результаты раскрывают механизм структурирования мономера через формирование прекурсоров, которые превращаются в прямые мицеллы в сильнополярной среде. Снижение полярности при замене воды диоксаном вызывает переход к обращенным мицеллам с полярными группами внутри. Однако в дейтерированном диоксане даже при высокой доле (0.255 моль/л) мономер создает обращенные мицеллы низкой степени агрегации ~ 4 . Введение малых количеств D_2O (5-10 % по объему) ведет к их дезинтеграции, а при 20 % воды отдельные мономеры преобладают в растворе. Повышение доли воды инициирует рост прямых мицелл, у которых числа агрегации достигают ~ 100 в полностью водной среде.

1. M.J. Gerber, L.M. Walker, Langmuir. 22, 941(2006).
2. A.Yu Bilibin, T. M. Shcherbinina, N. V. Girbasova, V. T. Lebedev, Yu V. Kulvelis, V. S. Molchanov, I. M. Zorin, Designed Monomers and Polymers, 19, 5, 369 (2016).



Морфология наноструктурированного оксигидроксида алюминия

А. Н. Ходан¹, Г. П. Копица^{2,3}, Х. Э. Ёров⁴, А. Е. Баранчиков⁵, В. К. Иванов^{5,6},
А. Feoktystov⁷, V. Pipich⁷

¹ Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

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

³ Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

⁵ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

⁶ Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

⁷ Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany

Настоящая работа [1] посвящена изучению микро- и мезоструктуры наноструктурированного оксигидроксида алюминия (НОА), формирующегося в виде высокопористого монолитного материала при окислении поверхности жидкометаллического раствора алюминия в ртути в воздушной среде с контролируемой температурой и влажностью. Методами рентгенофазового анализа, термического анализа, низкотемпературной адсорбции азота, просвечивающей электронной микроскопии, малоуглового и ультрамалоуглового рассеяния нейтронов, а также малоуглового рассеяния рентгеновского излучения проведены комплексные исследования как образцов НОА, синтезированных при 25 °С, так и изотермически отожженных при температуре до 1150 °С.

Установлено, что структура монолитных образцов может быть описана в рамках трехуровневой модели, включающей в себя наличие первичных неоднородностей (характерный размер $r_c \approx 9\text{--}19 \text{ \AA}$), формирующих фибриллы (радиус поперечного сечения $R \approx 36\text{--}43 \text{ \AA}$ и длиной $L \approx 3200\text{--}3300 \text{ \AA}$) или ламели (толщина $T \approx 110 \text{ \AA}$ и ширина $W \approx 3050 \text{ \AA}$), которые, в свою очередь, объединены в крупномасштабные агрегаты (характерный размер $R_c \approx 1.25\text{--}1.4 \text{ мкм}$) с незначительной шероховатостью поверхности. Показано, что высокая удельная площадь поверхности ($\sim 200 \text{ м}^2/\text{г}$), характерная для исходного НОА, сохраняется при его термическом отжиге до 900 °С, а в результате термической обработки при 1150 °С происходит ее уменьшение до $\sim 100 \text{ м}^2/\text{г}$ в результате спекания фибрилл.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 17-53-150007 НЦНИ_а).

1. А.Н. Ходан, Г.П. Копица, Х.Э. Ёров, А.Е. Баранчиков, В.К. Иванов, А. Feoktystov, V. Pipich, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования 2017 (принята в печать).



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Исследование эволюции микро- и мезоструктуры высокодисперсного оксида $ZrTiO_4$ на разных стадиях термической обработки

Е. П. Симоненко¹, Н. П. Симоненко¹, Г. П. Копица^{2,3}, Т. В. Хамова³,
С. В. Сизова⁴, В. Г. Севастьянов¹, Н. Т. Кузнецов¹, Н. В. Цвигун⁵,
Ю. Е. Горшкова⁶

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

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

³ Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт биоорганической химии им. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, Москва, Россия

⁵ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Москва, Россия

⁶ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Разработке методов получения сложных оксидов в системе ZrO_2 - TiO_2 , в том числе $ZrTiO_4$, уделяется достаточно большое внимание благодаря применимости в разных областях науки и техники, в частности, в качестве компонента гидрофильных мембран для ультрафильтрации, а также носителей катализаторов. Кроме того, $ZrTiO_4$ считается весьма перспективным материалом для оптических устройств, фотокатализаторов и для создания биосовместимых покрытий на стальных имплантах.

В настоящей работе апробирован метод получения наноструктурированного $ZrTiO_4$ с использованием золь-гель синтеза, а также методами РФА, СЭМ, УМУРН, МУРН, ДСК/ТГА и низкотемпературной адсорбции азота проведено изучение эволюции его микро- и мезоструктуры при термической обработке.

С использованием в качестве прекурсоров гетеролигандных координационных соединений класса $[M(O_2C_5H_7)_{4-x}(OR)_x]$ (где $M=Zr, Ti$) получен прозрачный титан-цирконий-содержащий гель. После его сушки и карбонизации ксерогеля образовавшаяся высокодисперсная система « $ZrTiO_4$ – углерод» применялась для изучения эволюции структуры оксидного продукта при отжиге от 500 до 1000°C.

Установлено, что образование кристаллической фазы происходит в узком интервале 690÷730°C. Прокаливание при температурах $T = 500$ и 600°C позволяет получить микро- и мезопористые рентгеноаморфные продукты состава $ZrTiO_4$ с $S_{уд} = 82 \div 150$ м²/г. При более высоких температурах обработки стартовой системы « $ZrTiO_4$ – С» образуется однофазный нанокристаллический порошок с $S_{уд} = 2.5 \div 15$ м²/г. Из экспериментальных сечений рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ нейтронов (Рис. 1) получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния и определены характерные радиусы R_c наночастиц $ZrTiO_4$. а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки. Проведено сравнение данных МУРН с результатами, полученными методами РФА, СЭМ и низкотемпературной адсорбции азота.



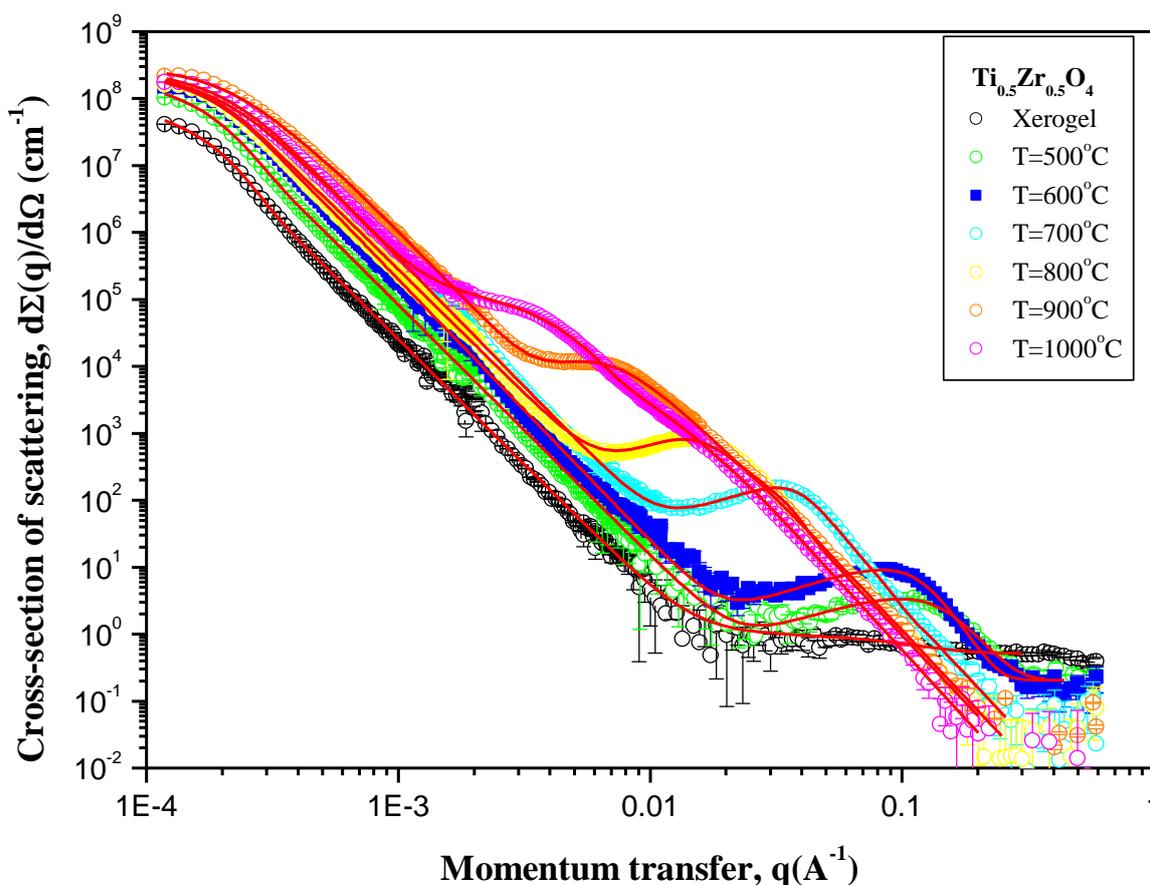


Рис. Дифференциальное сечение ультрамалоуглового и малоуглового рассеяния нейтронов $d\Sigma(q)/d\Omega$ образцами ксерогеля исходного состава « $\text{ZrTiO}_4 - \text{C}$ » и оксидов ZrTiO_4 , отожженных на воздухе при температурах $T_a = 500 \div 1000^\circ\text{C}$, от переданного импульса q .

Разработанная методика может также использоваться и при нанесении тонких наноструктурированных пленок, в том числе и в качестве чувствительных слоев химических газовых сенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 14-03-00983-а, 14-03-31002 и 15-29-01213-офи_м) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «Нано-структуры: Физика, Химия, Биология, Основы Технологий».



Исследование процессов агрегации наночастиц в смешанных оксидных золях и аэрогелях методом МУРР

Ю. В. Ларичев^{1,2}, Н. С. Нестеров¹, А. С. Шалыгин¹,
В. П. Пахарукова^{1,2}, О. Н. Мартьянов^{1,2}

¹ Институт катализа им. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Пористые материалы на основе оксидов кремния и алюминия находят широкое применение как адсорбенты, носители для катализаторов, катализаторы и функциональные материалы в различных областях применения [1-3]. Несмотря на большое число способов получения пористых оксидов, по-прежнему актуальны поиск и разработка новых способов приготовления данных материалов с заранее заданными свойствами. Одним из таких новых способов является сушка коллоидных растворов путем их распыления в сверхкритических условиях (supercritical antisolvent precipitation) [4,5]. Ранее эта методика получила распространение в фармацевтике, но в тоже время информации по ее использованию для сушки неорганических зольей пока не очень много. Совместное распыление смесей алюминий-оксидных и кремнеземных зольей представляет интерес для получения $\text{SiO}_2\text{-AlO}_x$ композиционных материалов, где кремнеземная матрица может быть упрочнена наночастицами оксида алюминия. Поэтому целью данной работы является исследование процессов агрегации частиц в смешанных золях при распылении их в сверхкритических условиях. Поскольку при сверхкритическом распылении материал зачастую получается рентгеноаморфным, то представляет интерес использовать метод МУРР для анализа происходящих процессов при сверхкритическом распылении зольей с варьированием соотношения Si/Al. Показано, что для исходных $\text{SiO}_2\text{-AlO}_x$ зольей, полученных из соответствующих алкоксидов, наблюдается существенное увеличение размера частиц при содержании алюминия в системе от 50 до 70%. При этом золи, содержащие как меньшее (от 5 до 30%), так и большее (90-100%) количество алюминия характеризуются уже существенно меньшими размерами частиц. Интересно отметить, что при сверхкритическом распылении данных смесей зольей, их дальнейшей сушке и прокалке наблюдается противоположный эффект по влиянию содержания Al на размеры частиц. Минимальные размеры частиц полученных порошков, напротив, характерны для распыленных зольей со средним содержанием Al (50-70%), а максимальные размеры наблюдаются для систем как с низким (5-30%), так и высоким (>70%) содержанием Al. Также в работе проведена характеристика полученных порошков и предложено объяснение данного явления, заключающегося в различных механизмах агрегации оксидных частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке РАН и ФАНО России (проект № V.44.1.17).



1. X. Fang, Z. Liu, M.F. Hsieh, M. Chen, P. Liu, C. Chen, and N. Zheng, ACS Nano 2012, 6, 4434–4444.
2. L.S. Cividanes, T.M.B. Campos, L.A. Rodrigues, D.D. Brunelli, and G.P. Thim, J. Sol-Gel Sci. Technol. 2010, 55, 111–125.
3. A. L. Nuzhdin, A.S. Shalygin, E.A. Artiukha, A.M. Chibiryaev, G.A. Bukhtiyarova, and O. N. Martyanov, RSC Advances. 2016, 6, 62501–62507
4. E. Reverchon, I. De Marco, E. Torino, J. Supercritical Fluids 2007, 43, 126–138.
5. N.S. Nesterov, V.P. Paharukova, V.A. Yakovlev, and O.N. Martyanov, J. Supercritical Fluids 2016, 112, 119–127.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



**Сессия VII. Установки
и техника МУР нейтронов.**

Председатель: Н.К. Плешанов



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Methods of Calibration of a Neutron Small Angle Scattering Instrument during Commissioning and Operation

H. Eckerlebe

Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Before getting started of neutron scattering instruments at PIK reactor into operation, beam tests of the neutron guides should be performed. Besides general radiation field measurements as well as tests of the effectiveness of the shielding, flux measurements at the end of the neutron guides should be performed. Various measuring methods will be presented to determine flux density and spectral distribution of the neutron beam as well as the quality of the neutron guides.

Measured Small-Angle-Scattering (SAS) intensity in absolute scale is necessary for many applications, for to combine or compare data from different instruments and methods (X-ray, neutrons) as well as to perform quantitative SAS analysis, such as calculating number density, volume fraction and specific area of the inhomogeneity inside of a sample. Different primary and secondary calibration methods will be presented for to measure the sensitivity of the detection system, the correspondence between the scattering vector and the channel number of the detector and the flux of the incident beam.



Установка ГОРИЗОНТ. Первые эксперименты по малоугловому рассеянию на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН

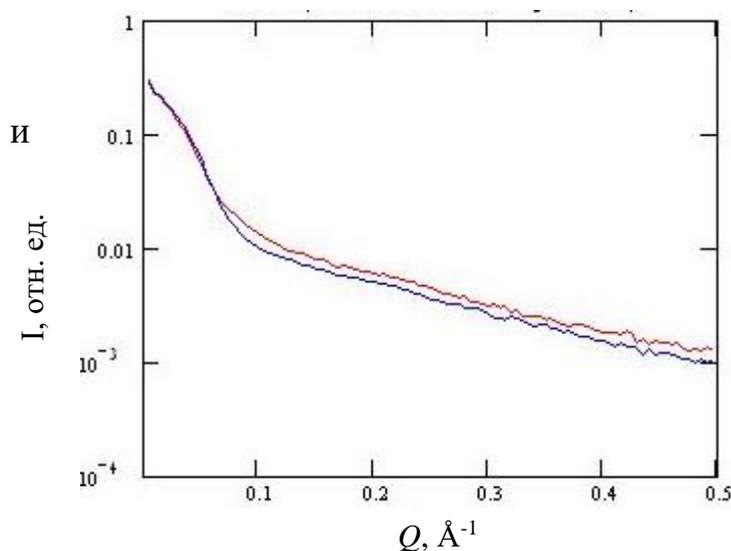
*В. С. Литвин^{1,2}, Р. А. Садыков¹, А. В. Чураков³, Д. Н. Трунов¹, С. Н. Аксенов¹,
С. И. Поташев¹*

¹ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

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

³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Установка «ГОРИЗОНТ» на импульсном источнике нейтронов ИН-06 (на базе линейного ускорителя протонов ИЯИ РАН) представляет собой нейтронный времяпролетный рефлектометр с вертикальной плоскостью рассеяния [1]. Также установка может использоваться для малоугловых экспериментов. Для этих целей



Спектры малоуглового рассеяния нейтронов на сплаве 40ХНЮ до (синий) и после упрочняющего отжига (красный). Получены на установке «Горизонт».

проведено дооснащение двухкоординатным монитором двухкоординатным детектором нейтронов, изготовленными ЛНФ ОИЯИ [2]. С помощью детекторов нейтронов ImagePlate и двухкоординатного монитора получены профили и спектры прямого пучка. Было установлено, что в прямом пучке отсутствуют быстрые нейтроны, благодаря изогнутому зеркальному нейтронному волноводу. Получены спектры малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН)

на тестовых образцах в качестве которых был использован сплав 40ХНЮ (Ni-основной, 38-41% Cr, 3.3-3.8% Al) до и после упрочняющего отжига. Отжиг приводит к образованию наночастиц и, как следствие, увеличение сечения МУРН. Данный характер зависимости сечения МУРН от термообработки сплава был ранее обнаружен нами в малоугловом эксперименте на установке KWS-II на реакторе FRM-II.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИЯИ РАН, программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 24 «Фундаментальные основы технологий наноструктур и наноматериалов» и программы ОФН РАН «Физика элементарных частиц, фундаментальная ядерная физика и ядерные технологии».

1. V. S. Litvin, V. A. Trounov, V. A. Ulyanov, et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* 340, 012032 (2012).
А. В. Белушкин, А. А. Богдзель, В. В. Журавлев и др., ФТТ 961, 5 (2010).



Малоугловое рассеяние: размеры глобулярных и вытянутых частиц в растворе, определяемые методом Гинье, занижены.

А. В. Смирнов, Б. А. Федоров

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

Метод Гинье получил широкое распространение в практике рентгеновском и нейтронного малоуглового рассеяния. Это объясняется тем, что этот метод позволяет определять размеры рассеивающих частиц (средневесовой электронный радиус инерции R_g) без каких-либо модельных представлений об их структуре. В то же время основной недостаток метода состоит в том, что при проведении эксперимента трудно обеспечить независимость рассеяния отдельными частицами. Это связано прежде всего с объемными эффектами, то есть с тем фактом, что центры двух частиц не могут сблизиться на расстояние, меньшее их минимального размера (эффект исключенного объема). Другой эффект, также приводящий к искажению кривой рассеяния, – неравномерность распределения молекул в пространстве (структурный эффект). Он определяется неоднородностями в распределении рассеивающих частиц на расстояниях, превышающих зону действия эффекта исключенного объема.

При низких концентрациях рассеивающих частиц эти эффекты могут быть незначительными, но при этом сама интенсивность рассеяния часто оказывается весьма слабой (например, разностная интенсивность, используемая для анализа структуры белков в растворе). Для улучшения качества экспериментальной кривой рассеяния следует повышать концентрацию частиц. В свою очередь, это приводит к усилению указанных эффектов, которые особенно заметно сказываются на самой малоугловой части кривой рассеяния, ответственной за определяемый с помощью метода Гинье радиус инерции частиц.

В настоящей работе проведен прямой расчет интенсивности малоуглового нейтронного (рентгеновского) рассеяния на вытянутых эллипсоидах вращения, вытянутых цилиндрах и шарах при их различных концентрациях с целью выявления и оценки эффекта исключенного объема.

Суть метода состоит в следующем. Рассматривается большая сфера радиуса R , объем которой последовательно и случайным образом заполняется какими-либо из указанных выше частиц. Частицы должны быть однородными, одинакового размера и формы и достаточно мелкими, так что их максимальные размеры $r_0 \ll R$. Если объем вновь вброшенной частицы не перекрывается с объемами предыдущих частиц, ее положение (и ориентация для вытянутых частиц) фиксируются, если перекрывается – частица выбывает из игры. По достижении требуемой объемной концентрации частиц их вброс прекращается. Далее, рассчитывается суммарная амплитуда рассеяния всех вброшенных



частиц. Дополнительная трудность состоит в том, что интенсивность рассеяния, как квадрат модуля этой амплитуды, будет зависеть не только от распределения частиц, но и от радиуса R большой сферы, однако использование принципа Бабине позволяет избавиться от этой зависимости. Таким образом, можно рассчитать интенсивность рассеяния в определенной точке вектора обратного пространства, а затем усреднить ее по всем точкам сферы обратного пространства с радиусом, равным модулю этого вектора.

Для всех трех типа частиц при различных их концентрациях были построены графики Гинье и рассчитаны радиусы инерции. Показано, что определяемые из построения Гинье радиусы инерции всех частиц заметно занижены по сравнению с их реальными значениями при объемной концентрации частиц $\sim 1\%$ и более. Рассчитаны и представлены поправочные коэффициенты, которые необходимо внести в экспериментально определенный радиус инерции для получения реального радиуса инерции этих частиц.



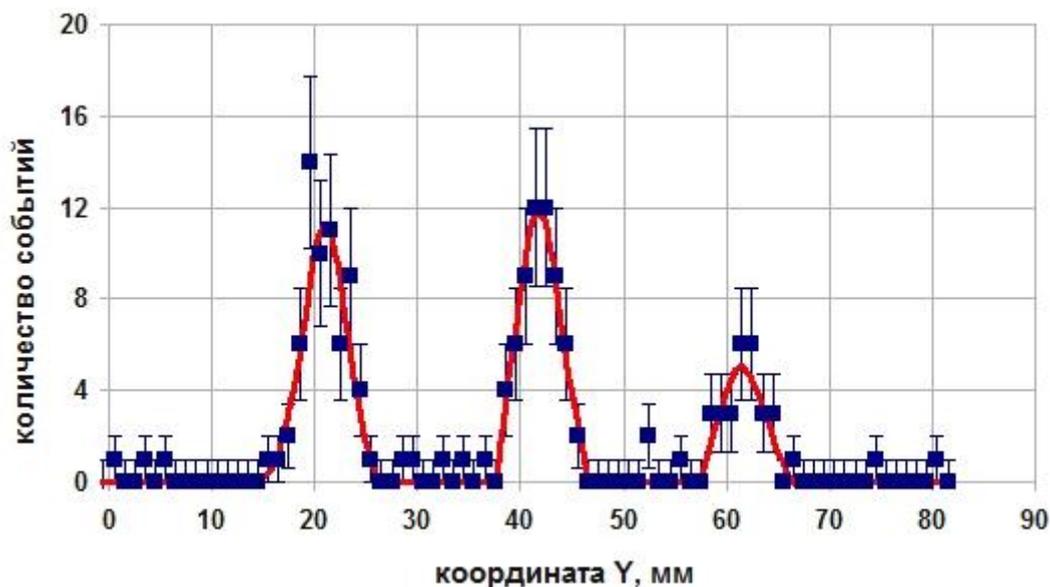
Исследование характеристик позиционно - чувствительного детектора нейтронов с активным слоем ^{10}B

С. И. Поташев¹, Ю. М. Бурмистров¹, Е. С. Конобеевский¹,
И. В. Мешков², С. В. Зуев¹, В. Н. Марин¹

¹ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

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

Исследовались характеристики позиционно-чувствительного детектора нейтронов с активным слоем ^{10}B с размерами $100 \times 100 \text{ мм}^2$ [1]. Работа детектора исследовалась с использованием вольфрам-бериллиевого фотонейтронного источника в Институте ядерных исследований РАН. Перемещение бериллиевой мишени внутри источника позволяет изменять соотношение тепловых и быстрых нейтронов в спектре источника. Также для уменьшения соотношения тепловых нейтронов перед детектором устанавливался экран-маска из кадмия. Эффективность детектора в области теплового спектра исследовалась относительно ^3He -счетчика и составила от 1 до 4% в зависимости от энергии нейтронов. Такое значение эффективности позволяет использовать детектор при высоких потоках нейтронов. В режиме работы источника в потоке нейтронов с обогащением тепловыми нейтронами использовался экран-маска из кадмия с щелями. Получено позиционное разрешение не хуже $\sim 2 \text{ мм}$ по горизонтальной и $\sim 4 \text{ мм}$ по вертикальной координате. На рисунке показан координатный спектр вдоль вертикальной оси при использовании кадмиевой маски с тремя горизонтальными щелями.



Координатный спектр вдоль вертикальной оси, полученный с кадмиевой маской с тремя горизонтальными щелями шириной 3 мм. Красные кривые – аппроксимация гауссианами.



Получены спектры времени появления сигналов от тепловых нейтронов относительно синхроимпульса ускорителя, измеренные как позиционно-чувствительным детектором, так и счетчиком с наполнением гелием-3. Сигналы со счетчика регистрировались в виде цифровых осциллограмм, что позволяло измерять как амплитуду и время появления сигнала, так и его форму. Проведен анализ двумерных корреляций различных пар из четырех амплитуд сигналов позиционно-чувствительного детектора. Отбор событий по соответствующим амплитудам позволяет оценить вклады тепловых и быстрых нейтронов в спектре источника. Одновременная регистрация тока пучка в режиме реального времени позволяла нормировать количество зарегистрированных нейтронов на единицу тока. Показана возможность работы детектора при длительном периоде между заполнениями газом с целью экономии рабочего газа.

1. С. Х. Караевский, С. И. Поташев и др. Журнал "Научное приборостроение". 5, 27, № 1. (2017).





**Сессия VIII. Малоугловое
рассеяние
на реакторе ПИК.**

Председатель: Е.В. Москвин



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



И. С. Шишкин¹, Е. В. Москвин¹, Н. Eckerlebe², С. В. Григорьев¹

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

² Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Малоугловой дифрактометр поляризованных нейтронов SANS-2 предназначен для исследований в области материаловедения (дефекты, пористость), физики металлов (выделившиеся фазы, кластеры), технологии наноструктур и наноматериалов (мезопористые системы, мембраны, фотонные кристаллы), физики сложных магнитных структур (ферромагнитных спиралей, спиновых корреляций при критических явлениях в ферромагнетиках), физике и химии коллоидных частиц (микроэмульсии, коллоидные растворы, жидкие кристаллы), физики сверхпроводников и т.д.

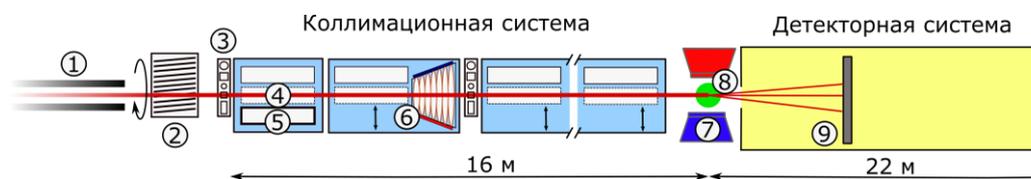


Рис. Малоугловой дифрактометр SANS-2

В качестве основных характеристик малоуглового дифрактометра поляризованных нейтронов SANS-2 (рис.) можно выделить следующие: белый пучок нейтронов доставляется от реактора с помощью нейтронновода (1) к монохроматизатору - селектору скоростей (2), работающий в диапазоне длин волн от 4.5 до 20 Å с разрешением $\Delta\lambda/\lambda = 0.1$; коллимация пучка происходит в коллимационной трубе длиной 16 м посредством коллиматоров (3) с круглыми и квадратными апертурами (4) на входе с максимальным размером окна $30 \times 30 \text{ мм}^2$; возможность проведения экспериментов с использованием поляризованных нейтронов осуществляется компактным трансмиссионным поляризатором (5) на кремниевых пластинах с суперзеркальным CoFe/TiZr ($m = 2$) покрытием; поляризующая эффективность и коэффициент пропускания пучка равны 0.99 и 0.88, соответственно; для изменения направления поляризации пучка используется радиочастотный адиабатический флиппер (6); узел образца имеет возможность установки электромагнитов на 1.5 и 2.5 Тл (7), линейного и вращающегося столиков, рефрижератора закрытого цикла ($T = 10\text{-}340 \text{ К}$); рассеянные на образце (8) нейтроны поступают в детекторную трубу и регистрируются двухкоординатным позиционно-чувствительным детектором (9) размером $55 \times 55 \text{ см}^2$ с разрешением $0.7 \times 0.7 \text{ см}^2$; расстояние образец-детектор составляет $1 \leq d \leq 22 \text{ м}$; доступный диапазон по переданному импульсу $0.008 \leq q \leq 7 \text{ нм}^{-1}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (грант №14.616.21.0004 от 17.09.14 г., RFMEFI61614X0004).



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Finding the empty-beam-calibration for a SESANS setup in a beam line at PIK

W. H. Kraan¹, L. A. Akselrod², V. N. Zabenkin², Yu. O. Chetverikov², S. V. Grigoriev² and A. A. Sumbatyan²

¹ retired from: Delft University of Technology, Delft, The Netherlands

² Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre "Kurchatov Institute", Gatchina, Russia

SESANS is a neutron Spin-Echo (SE) experiment in devices, effectively operating as regions of length L with magnetic field B , shaped as *parallelograms* [1]. The precession phase "collected" along a trajectory at angle ψ (insert Fig) through such a device is

$$\phi \approx \lambda (cBL + \Gamma \psi) \quad (1)$$

($c = 4\pi\mu_n m_n / h^2 = 4.632 \cdot 10^{14} T^{-1} m^{-2}$; μ_n , m_n , h = neutron mass, magn. moment and Planck's constant). $\lambda\Gamma\psi$ is the angle labeling term, Γ is called "labeling coefficient".

Suppose a neutron is scattered by $\psi_2 - \psi_1 = \theta_s$ in horizontal direction perpendicular to the beam axis. Then, using (1) we can calculate the *offset* $\phi_1 - \phi_2 = \lambda\Gamma\theta_s$ due to this process. It has wavevector transfer $Q = (4\pi/\lambda)\sin(\theta_s/2) \approx 2\pi\theta_s/\lambda$. If we divide the offset by Q , we get a quantity of dimension length:

$$\delta = \lambda\Gamma\theta_s/Q = \Gamma\lambda^2/2\pi, \quad (2)$$

called "spin-echo length". δ depends on the setup parameters θ_0 , L , B and on λ .

The **aim of this report** is to find the **coefficient** Γ and the **empty beam polarisation** \mathbf{P}_0 for a setup, with each SE-arm made up of 2 *adiabatic/RF/gradient flip-pers* in special DC magnets existing at PNPI. To get $\Gamma \neq 0$, their poles are shaped as parallelograms with apex angle $\theta_0 = 33.5^\circ$.

We made software to calculate the (DC/RF/gradient) fields experienced through the setup (4 flippers) along trajectories in a *divergent-ribbon-beam*: the beam defined by 2 vertical slits (2cm high) at distance equal to the total length (4.4 m) of the setup.

The section of a trajectory through each flipper is divided in N steps with fields supposed homogeneous. We simulate Larmor precession as the product of 4 progressing products $P_{i,j}^k$ ($i, j = x, y, z$) of rotation matrices (with number of factors increasing from 1... N) operating on the classical "polarisation vector" - in a coordinate system *rotating* around the DC field direction at the frequency ω_{RF} of the RF coils in the flippers (*time dependence of the RF fields "transformed away" by subtracting a homogeneous field* $B^* = \omega_{RF}/\gamma$; $\gamma/2\pi = 29126$ kHz/T). As input we take the polarisation vectors (100 010 001) from an ideal " $\pi/2$ -flipper" in front. The final matrix product are the polarisation components passing through an ideal $\pi/2$ -flipper behind the setup.

To study SE, we *must* follow the collected precession phase. After each step k we calculate this phase by: $\phi_k = \tan^{-1}(P_{y,x}^k / P_{y,y}^k)$. The result comes in the interval



$[-\pi, \pi]$. If we choose the number N so high that $\phi_k < \pi$ for all k , we can recover the multiples of 2π . Thus, we can find the final precession phase Φ for all trajectories in our beam through the full setup *without sample*, for given λ . It appears that the SE is not sharp – there is a spread in Φ (for example, for $\lambda = 3 \text{ \AA}$ up to 4 rad).

To get the polarisation \mathbf{P}_0 , we must insert a “phasecoil” in the setup, to make offset from SE by adding precession phase $\Delta\phi$ (equal for all trajectories) in SE-arm 2. \mathbf{P}_0 is the amplitude of the signal

$$P_{yy} = \langle \cos(\Phi + \Delta\phi) \rangle_{\text{beam}}$$

We calculated these signals for $\lambda = 2 \dots 10 \text{ \AA}$, varying $\Delta\phi$ in 13 steps from $-\pi$ to π . Their amplitudes are identical with $\mathbf{P}_0(\lambda)$. Using (2) we convert λ to spin-echo length δ . Then we arrive at the **empty-beam-calibration** $\mathbf{P}_0(\delta)$ of the setup, supposed to be installed in a beam line of PIK. We also find: the signals for *divergent-ribbon-beams* until 2.5 mrad away from the beam axis are practically in-phase.

We conclude: a SESANS setup based on the existing DC magnets will have an acceptable $\mathbf{P}_0(\delta)$ up to $\delta = 20 \text{ \mu m}$, with a beam of divergence (FWHM) up to 5 mrad.

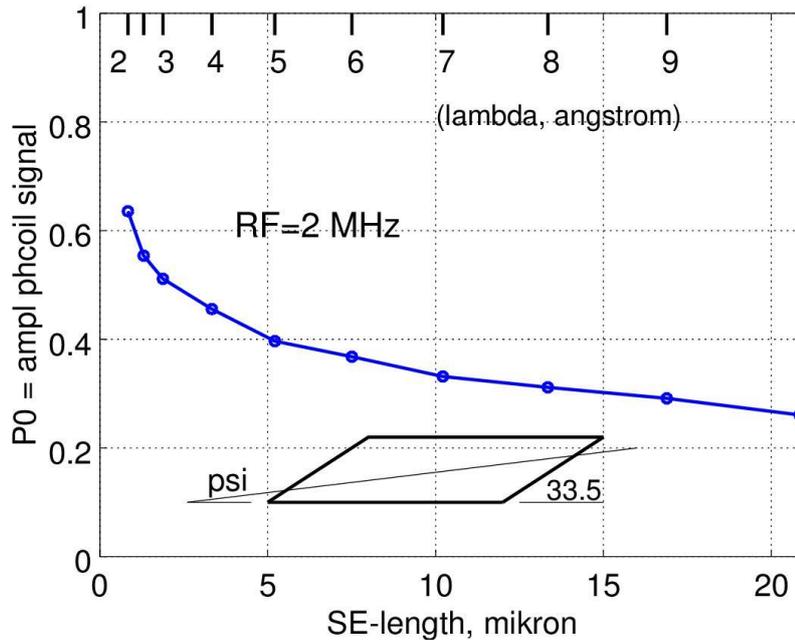


Fig. Empty-beam polarisation \mathbf{P}_0 in a SESANS setup based on DC magnets existing at PNPI, with poles shaped as 33.5° -parallelograms, flippers in each SE-arm 1.4 m apart.

1. M. Th. Rekveldt, J. Plomp, W. G. Bouwman, W. H. Kraan, S. V. Grigoriev, and M. Blaauw, Rev. Sci. Instr **76** (2005) 033901.





**Сессия IX. Рефлектометрия
на реакторе ПИК.**

Председатель: **И.П. Коник**



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

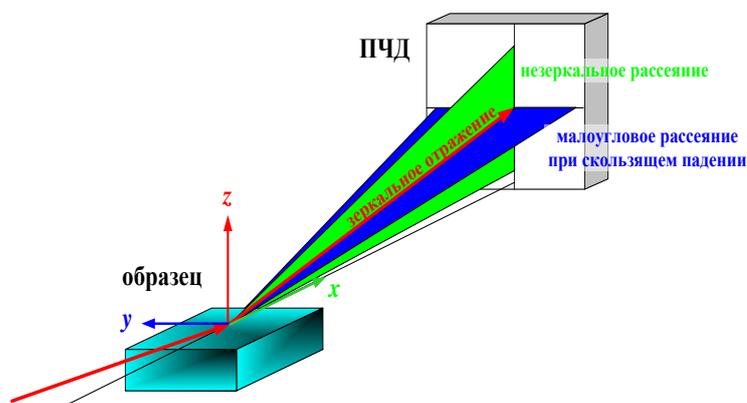


О проектировании нейтронных рефлектометров на реакторе ПИК

Н. К. Плешанов

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

За последнюю декаду нейтронная рефлектометрия стала мощным методом исследования поверхностей, тонких плёнок и многослойных структур, физических и химических процессов на границах, био-процессов с взаимодействием и переносом веществ через границы, мембраны и т.д. Это предопределяет необходимость создания на реакторе ПИК парка специализированных взаимодополняющих нейтронных рефлектометров. В докладе будет представлен обзор активности по выработке концепции этих рефлектометров и анализу возможных технических решений (частично результаты анализа уже опубликованы [1-7]).



Взаимодействие падающих нейтронов с поверхностью образца приводит, в общем случае, к их рассеянию по трем основным каналам. Интенсивность зеркального отражения в основном задается эффективным потенциалом, получающимся после усреднения по латеральным координатам. Сечения незеркального и малоуглового рассеяния при скользящем падении в основном определяются особенностями латеральной структуры, соответственно, в плоскости зеркального отражения (ось x) и перпендикулярно этой плоскости (ось y).

Работа выполняется при финансовой поддержке Федеральной целевой программы (ФЦП) Минобрнауки РФ (проект № RFMEFI61614X0004).

1. Н. К. Плешанов, Поверхность. Рентген., синхр. нейтр. исслед. 8, 20 (2016)
2. N. K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A 820, 146 (2016)
3. N. K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A 834, 197 (2016)
4. A.G. Gilev, N.K. Pleshanov, B.A. Bazarov, A.P. Bulkin, A.F. Schebetov, V.G. Syromyatnikov, V.V. Tarnavich, V.A. Ulyanov, Nucl. Instrum. Methods A 833, 233 (2016)
5. N. K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A 866, 213 (2017)
6. V. G. Syromyatnikov, to be published in the Proceedings of International Conference on Neutron Optics in the Physical Society of Japan Conference Proceedings (2017)
7. N. K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A 872, 139 (2017)



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Нейтронный прерыватель нового типа и его использование в эксперименте

В. Г. Сыромятников

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

Предложен прерыватель нейтронного пучка нового типа. Этот прерыватель предназначен для использования в измерениях, проводимых по времяпролетной методике. С его помощью можно сформировать нейтронный спектр, заданной ширины, уменьшить время ТОФ измерений, полностью исключить нежелательный вклад длинноволновых нейтронов. В докладе обсуждается использование предлагаемого прерывателя в нейтронном эксперименте, проводится сравнение с известными нейтронными прерывателями.

1. V.G. Syromyatnikov. The Proceedings of International Conference on Neutron Optics (NOP2017) in the Physical Society of Japan Conference Proceedings, 2017.





МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



A SAXS study of mesoporous internally nanostructured lipid particles for combination therapies

B. Angelov¹, V. M. Garamus², A. Angelova³

¹ *Institute of Physics, ELI Beamlines, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Republic*

² *Helmholtz-Zentrum Geesthacht: Centre for Materials and Coastal Research, Geesthacht, Germany*

³ *Institut Galien Paris-Sud, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay, Châtenay-Malabry, France*

Recently developed macromolecular drugs display strong potential to cure diseases involving genetic components, *e.g.* Rheumatoid arthritis, diabetes, Alzheimer's disease, and several types of cancers. We employ synchrotron small angle X-ray scattering (BioSAXS beamline at Petra III, DESY, Hamburg) to study the nanostructure formation, macromolecular drug upload, and the topological transformations occurring upon complexation of lipid carriers with therapeutic macromolecules. Supercoiled plasmid DNA encoding for the therapeutic protein brain-derived neurotrophic factor (BDNF) appears to be an outstanding macromolecular drug candidate in neuroregenerative therapies. It possesses negative charges which easily interact with cationic lipid nanocarrier assemblies. The created complexes are stable and enable efficient drug delivery. The performed SAXS measurements provided new knowledge and understanding of the liquid crystalline nanostructure formation (hexosomes, cubosomes, intermediate mesophases, and onion-type complexes). These structural results are expected to contribute to the progress in precision nanomedicine and the treatment of different severe diseases.

Acknowledgements: B.A. is supported by the project ELI - Extreme Light Infrastructure – phase 2 (CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_008/0000162) and ELIBIO (CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000447) from European Regional Development Fund, and the Czech Science Foundation Grant GACR 17-00973S. We also acknowledge the allocation of beam time at the Synchrotron Radiation Facility DESY (Deutsche Elektronen Synchrotron, Hamburg, Germany) – storage ring PETRA III, BioSAXS beamline P12 of the European Molecular Biology Laboratory (EMBL).

1. Angelov B, Garamus VM, Drechsler M, Angelova A. Structural analysis of nanoparticulate carriers for encapsulation of macromolecular drugs. *J Mol Liquids*, 2017, 235, 83-89.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Structural studies of dielectric HDPE+ZrO₂ polymer nanocomposites

A. A. Nabiye^{1,2}, A. Kh. Islamov², A. M. Maharramov¹, A. S. Doroshkevich^{2,4},
A. Pawlukojs^{2,4}, M. I. Rulev^{2,6}, A. I. Kuklin.^{2,3}

¹ ANAS Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³ Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

⁴ Institute of Nuclear Chemistry and Technology, Warsaw, Poland

⁵ Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O.Galkin of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

⁶ Moscow State University, Moscow, Russia

The aim of the work was to study the structure of HDPE+ZrO₂ polymer nanocomposites with the different methods. In recent years studies in the field of development of materials with special and practically important electrophysical, structural and mechanical properties based on polymer nanocomposites, containing ceramic nanoparticles and their oxides, have greatly expanded due to the use of such multi-functional materials in the development of new, more efficient electroactive elements of dielectronic devices. Despite the great advances, reached in this area, the ascertainment of interaction mechanisms between organic and inorganic phases in such nanocomposite systems remains an important and not fully studied question of developing new polymer composite materials (PCM), having a combination of various properties that allow using them in different applications [1, 2].

In the past decade, high density polyethylene (HDPE) and ultra-high-molecular-weight polyethylene (UHMWPE) which belongs to a new generation of polymers are being used as a matrix by applying nanotechnology approaches modifying the base polymers with nanodisperse additives in order to improve the performance properties of polymer composite materials [2]. In this case it becomes possible to adjust the structure and properties of the materials in wide range due to nucleating and orientation effects, changes in conformation of macromolecules, their chemical binding to the surface of nanosize particles and “healing” of defects in the structure.

Structural properties of HDPE+ZrO₂ nanocomposites were studied by small-angle neutron scattering (SANS), X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy in this work. SANS experiments were performed with the two-detector system [3] YuMO instrument of pulsed reactor IBR-2M at the Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia. The measured neutron scattering spectra were corrected for the transmission and thickness of the sample, background scattering on the film substrate and on the vanadium reference sample using SAS software [3], yielding a neutron scattering intensity in absolute units of cm⁻¹. The measurements were carried out in the temperature range from 25⁰C to 132⁰C.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

The definition of phase composition and type of crystal structure has been performed on the conventional X-ray diffractometer EMPYREAN (firm PANalytical) in Cu- $K\alpha$ radiation with Ni filter in the room temperature (25 °C).

Raman spectroscopy was carried out on the Lab RAM HR Evolution microscope. A HeNe laser (633nm) was used on the instrument.

3. M.M. Guliyev, R.S. Ismayilova, A.A. Nabiyev, Journal of Radiation Research, Vol.3, №1, (2016).
4. Guliyev M.M., Maharramov A.M., Ismayilova R.S., Nabiyev A.A. Perspective materials, № 7, 17-22, (2015).
5. Kuklin, A. I., Islamov, A. K., & Gordeliy, V. I. Neutron News, 16(3), 16-18. (2005).



Модель фрактальной частицы гидратированного диоксида циркония: интерпретация данных малоуглового рассеяния нейтронов

Л. А. Азарова^{1,2}, *Г. П. Копица*¹, *Е. Г. Яшина*^{1,2}, *В. М. Гарамус*³, *С. В. Григорьев*^{1,2}

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

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

³ *Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

Диоксид циркония (ZrO_2) имеет множество промышленных применений благодаря своим уникальным физико–химическим свойствам. Этот материал является одним из ключевых для компонентов датчиков, катализаторов и носителей катализаторов, мембран, твердых электролитов в твердотельных окисных топливных элементах и т.д. [1-8] Поэтому для различных задач важно уметь синтезировать структуры с заданными параметрами, такими как фрактальная размерность, удельная поверхность и размер частиц. Изменяя температуру отжига или рН можно получать структуры с необходимыми параметрами [9–11]. Однако систематические зависимости получаемой структуры диоксида циркония от температуры и рН на сегодняшний день плохо изучены, особенно в отношении фрактальной размерности. Таким образом, особый интерес в изучении фрактальных свойств представляет анализ влияния внешних воздействий на величину фрактальной размерности, а также исследование различных типов фрактальных структур и переходов между ними.

В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов определены параметры мезоструктуры диоксида циркония и их эволюция на разных стадиях термической обработки. Установлено, что частицы аморфного диоксида циркония, формирующие структуру объемного фрактала с размерностью $D_V = 2.55$, в процессе отжига при температурах равной или большей $400\text{ }^\circ\text{C}$ трансформируются в плотное ядро и оболочку со структурой поверхностного фрактала, имеющего размерность поверхности $D_S = 2.8$. Обнаруженная трансформация фрактала из объемного в поверхностный, вероятно, коррелирует с кристаллизацией частиц гидратированного диоксида циркония при высоких температурах отжига.

Предложена модель формирования фрактальной частицы, подразумевающей существование поверхностного фрактала на плотном ядре. Показано, что характерный радиус ядра наночастиц ZrO_2 возрастает с повышением температуры отжига от $14\text{ }\text{\AA}$ до $200\text{ }\text{\AA}$ в диапазоне $400\div 600\text{ }^\circ\text{C}$, и насыщается при больших температурах.

1. I. Beurroies, L. Duffours, P. Delord, T. Woignier, J. Phalippou. *J. Non-Cryst. Solids* 241, 38 (1998).
2. H. Xie, J. Wang, P. Qan. *Phys. Lett. A* 218 275 (1996).
3. A. Emmerling, W. Lenhard, J. Fricke, G.A.L. van de Vorst. *J. Sol-Gel Sci. Technol.* 8, 837 (1997).
4. W.L. Huang, S.H. Cui, K.M. Liang, Z.F. Yuan, S.R. Gu. *J. Phys. Chem. Solids* 63, 645 (2002).
5. W.L. Huang, S.H. Cui, K.M. Liang, S.R. Gu. *J. Phys. Chem. Solids* 62, 1205 (2001).
6. W.L. Huang, K.M. Liang, S.R. Gu. *Matter. Lett.* 46, 136 (2000).



7. D. Sen, A.K. Parta, S. Mazumder, S. Ramanathan. *J. Alloys Comp.* 340, 236 (2002).
8. H.J. Glass, G. de With. *J. Mater. Characterization* 47, 27 (2001).
9. V. K. Ivanov, G. P. Kopitsa, A. Ye. Baranchikov, M. Sharp, K. Pranzas, and S. V. Grigoriev. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, Vol. 54, No. 14, 2091–2106 (2009).
10. V. K. Ivanov, G. P. Kopitsa, A. E. Baranchikov, S. V. Grigor'ev, and V. M. Haramus. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2010, Vol. 55, No. 2, 155–161 (2010).
11. V.K. Ivanov, G.P.Kopitsa, O.S.Ivanova, A.Ye.Baranchikov, K.Pranzas, S.V. Grigoriev. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 75, 296–299, (2014).



Везикулярная структура нанолечения Доксолип

И. Д. Дмитриев, А. И. Иваньков, М. А. Киселев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Работа посвящена исследованию морфологии и структуры нанолечения доксолип методом малоуглового рассеяния нейтронов.

Нанолечение доксолип разработано в Институте биомедицинской химии, г. Москва. Оно представляет из себя наночастицу из соевых фосфолипидов, в которую встроено водонерастворимое лекарство доксорубицин. Уникальной особенностью технологии формирования наночастиц доксолипа является использование водных растворов мальтозы. При этом весовое соотношение фосфолипидов к мальтозе составляет 1/4. Фармацевтические концентрации лекарства при его применении составляют 20-25%. Размер наночастицы доксолип варьируется в диапазоне от 400 Å до 200 Å. Используемые в Институте биомедицинской химии методы не позволяют ответить на вопрос о морфологии наночастицы доксолипа, а также о внутренней структуре этой наночастицы. Для ответа на вопрос о морфологии наночастиц доксолипа и их внутренней структуре был применен метод малоуглового рассеяния нейтронов.

Измерения выполнялись на установке ЮМО реактора ИБР-2 при трех концентрациях доксолипа в тяжелой воде 5%, 10% и 25% и температурах 20 °С и 37 °С. Обработка спектров проводилась программой SASview.

Наиболее точно удалось описать спектры при концентрации доксолипа в тяжелой воде 5%: $\chi^2 = 2.7$ при температуре образца 20 °С и $\chi^2 = 1.6$ при температуре образца 37 °С. Увеличение концентрации доксолипа приводит к возникновению межвезикулярного взаимодействия, которое учитывалось методом твердых сфер при концентрации доксолипа 25%. При концентрации доксолипа в тяжелой воде 10% расчет без учета структурного фактора дает $\chi^2 = 7.6$. Учет структурного фактора при концентрации доксолипа 25% дает $\chi^2 = 10.3$, без учета структурного фактора - $\chi^2 = 22.0$. Анализ спектров проводился с учетом функции разрешения инструмента. Сделано сравнение точности расчетов с учетом функции разрешения инструмента и без учета. Результаты показывают, что везикулярная морфология стабильна при изменении концентрации и температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-12-00516.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.



Зависимость магнитных свойств инвертированных опалов от толщины контактов: пределы применимости модели спинового льда

И. С. Дубицкий¹, А. А. Мистонов^{1,2}, Н. А. Григорьева¹, С. В. Григорьев^{1,2}

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

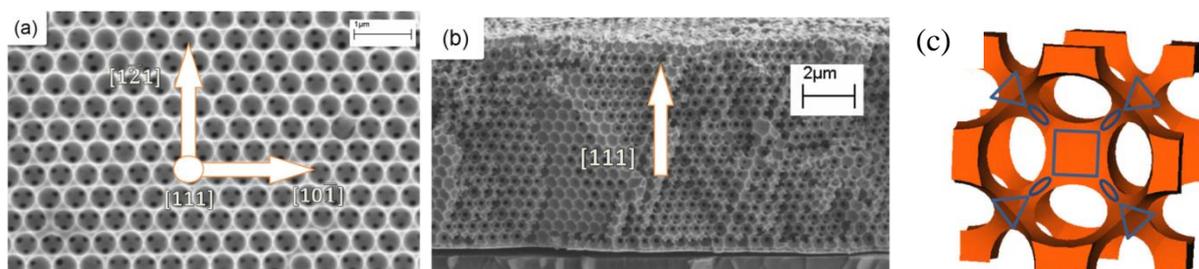
² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Инвертированные опалы, выполненные из никеля и кобальта, представляют собой трехмерную сеть нанообъектов, связанных между собой удлиненными контактами (ножками-перемычками) [1]. Магнитные свойства инвертированных опалов существенно зависят от геометрических параметров контактов, которые, в свою очередь, могут быть заданы в процессе синтеза. Настоящая работа посвящена выявлению данной зависимости в рамках микромагнитного моделирования.

Было установлено, что контакты однородно намагничены в широком диапазоне значений внешнего поля. Показано, что наличие слишком длинных или коротких контактов приводит к неприменимости правила льда к инвертированным опалам. Найдено оптимальное, с точки зрения реализации правила льда, соотношение сторон контактов.

Одним из следствий модели спинового льда, допускающим экспериментальную проверку, является появление компоненты намагниченности перпендикулярной внешнему полю при приложении последнего вдоль определенного кристаллографического направления мезоструктуры инвертированного опала ($[1\bar{2}1]$ на рис.). Величина данного эффекта также зависит от геометрических параметров контактов. Были найдены параметры, соответствующие максимальному значению перпендикулярной компоненты.

В ходе расчетов также были вычислены магнитные форм-факторы инвертированных опалов на основе кобальта и их зависимости от величины внешнего поля. Данные зависимости могут быть непосредственно сопоставлены с результатами экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов на инвертированных опалах.



Изображение поверхности (a) и скола (b) инвертированного опала на основе никеля, полученное с помощью СЭМ. Элементарная ячейка инвертированного опала (c).



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (<http://www.cc.spbu.ru/>). Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ проекта 14-22-01113 офу_м.

1. A. Mistonov, N. Grigoryeva, A. Chumakova, H. Eckerlebe, N. Sapoletova, K. Napolskii, A. Eliseev, D. Menzel, S. Grigoriev, Three-dimensional artificial spin ice in nanostructured co on an inverse opal-like lattice, PRB **87** (22) (2013) 220408.



Интерференция нейтронных волн при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов на ферромагнитных сплавах

А. В. Ковалев

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

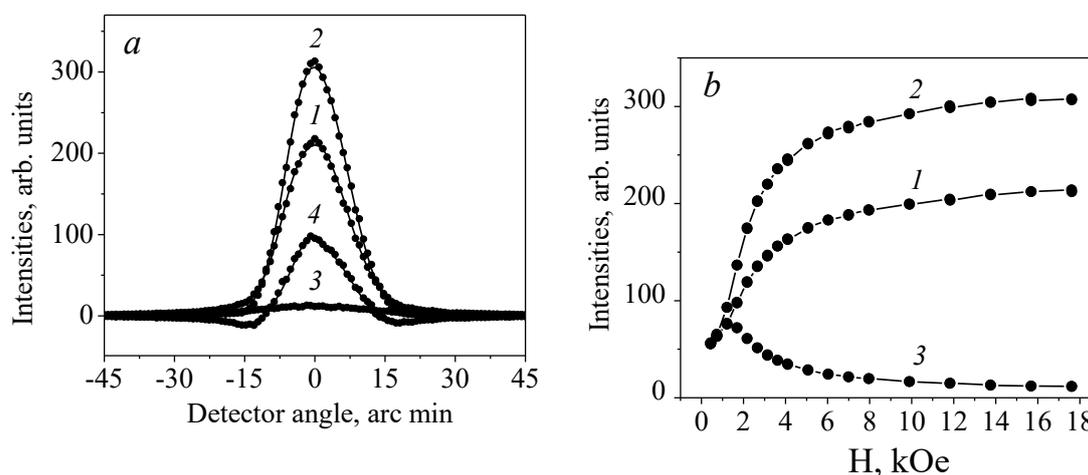
Метод малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов (SAPNS) позволяет, в частности, изучать процессы формирования магнитных неоднородностей в ферромагнитных сплавах. Результаты таких исследований представляют определенный интерес для решения некоторых практических задач физики магнитных материалов. Но сравнение экспериментальных данных, полученных при отжиге сплавов $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ и $\text{Co}_{68}\text{Fe}_{32}$ [1], показало, что при их анализе необходимо учитывать эффект, который выглядит как нарушение оптической теоремы [2] (сохранение числа частиц при упругом рассеянии). Принято считать, что выполнение этой теоремы для SAPNS означает сохранение интегральной интенсивности прошедших через образец нейтронов после изменения направления поляризации прямого пучка. Причиной возможного нарушения этого условия предлагалось считать интерференция нейтронных волн в области расходимости прямого пучка, которая приводит к росту изотропного рассеяния [3]. На самом деле в нашем случае проявляется, по-видимому, общее свойство квантовых процессов, в которых наблюдаются эффекты интерференции. Наглядный пример сохранения общего числа фотонов при отражении света плоскопараллельной пластинкой изложен в книге Р. Фейнмана [4].

При удачном выборе образца «нарушение» оптической теоремы легко обнаружить на любой установке SAPNS, которая позволяет измерять интегральные интенсивности пиков «рассеянных» нейтронов. Возможность наблюдения такого эффекта связана с тем, что разность фаз прямой и рассеянной волн $\Delta\psi = \pi$. Необходимая же степень коллинеарности соответствующих волновых векторов при рассеянии на ферромагнитных сплавах казалась невозможной. В литературных источниках результатов исследований в этом направлении не обнаружено. Поэтому нами изучались условия реализации и возможности использования рассматриваемого эффекта. Измерения выполнялись на установке «Вектор» (реактор ВВР-М, Гатчина).

Предварительные результаты приведены в публикациях [1,5]. Максимальная величина отношения интегральных интенсивностей центральных пиков $N = Q(\text{down})/Q(\text{up}) = 3.1(2)$ получена на сплаве ЮНДК (ALNICO), в котором имеется упорядоченная структура двух фаз с периодом $D = 55(2)$ nm. Измерения выполнялись без анализа поляризации «рассеянных» нейтронов (двухординатный детектор). Более интересные результаты получены на сплаве $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ при измерении интенсивностей четырех пиков: $J(00)$, $J(01)$, $J(11)$ и $J(10)$, где цифрами 0 и 1 обозначены направления спинов



нейтронов до и после образца. В частности, признаком изучаемого эффекта являются разные интегральные интенсивности пиков «без переворота спина нейтрона». Отношение интенсивностей $N = Q(11)/Q(00)$ зависит от режима термической обработки образца, его толщины, величины и направления приложенного к нему магнитного поля. Происхождение пиков «с переворотом спина нейтрона» связано с механизмом прохождения нейтронных волн через магнитно-неколлинеарные границы. Пример экспериментальных данных, полученных при горизонтальном поле, показан на рисунке.



Угловые зависимости интенсивностей $J(00)$ (1), $J(11)$ (2), $J(01)$ (3) и разности $[J(11) - J(00)]$ (4) для сплава $Co_{67}Fe_{31}V_2$, отожженного при $500\text{ }^\circ\text{C}$; $H = 17.6\text{ kOe}$.
 а) Соответствующие изменения интенсивностей в центральной счетчике угломерной системы при намагничивании образца.

Коллимация нейтронного пучка, перпендикулярного плоскости пластинки толщиной $d = 1.2\text{ mm}$, задавалась вертикальными щелями. Причиной слабого отличия полуширин $W(00) = 15.0'$ и $W(11) = 13.9'$ является анизотропия магнитного рассеяния, признаком которого является характерный вид кривой $[J(11) - J(00)]$. При $H = 17.6\text{ kOe}$ $N = 1.25(1)$. (На других образцах получена минимальная величина $N \approx 0.01$). При вращении электромагнита с образцом вокруг вертикальной оси величина N сильно изменяется, но «поляризация» $P(11) = Q(11)/Q(10) \approx \text{const}$. Этот результат оказывается прямым доказательством указанного выше происхождения пиков $J(01)$ и $J(10)$.

Автор выражает глубокую благодарность В. В. Рунову – за участие в измерениях и М. К. Руновой – за возможность использования разработанных ею компьютерных программ.

1. А. В. Ковалев, О. П. Смирнов. ФТТ 55, 81 (2013).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. ГИФМЛ, М. (1963). С. 551.
3. В. Р. Toperverg. Physica B 335, 174 (2003).
4. Р. Фейнман. КЭД – странная теория света и вещества. М.: Наука. 1988. 144 с.
5. А. В. Ковалев. Междунар. научн. конф. „Актуальные проблемы физики твердого тела“. Сб. докл. Минск (2016). Т. 1. С. 30.



Исследование структуры фосфолипидной транспортной наносистемы методами МУРН и МУРР

В. А. Маслова¹, А. И. Иванов^{1,2,3}, А. Ю. Грузинов⁴, Е. В. Земляная¹,
М. А. Киселев¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³ Институт проблем АЭС, Чернобыль, Украина

⁴ European Molecular Biology Laboratory, DESY, Гамбург, Германия

Фосфолипидная транспортная наносистема (ФТНС) – это транспортные наночастицы очень малого размера (150-250 Å), которые имеют строение однослойных везикул [1,2]. ФТНС используется для транспортировки водонерастворимых лекарств. Применение ФТНС увеличивает терапевтическую эффективность лекарств [3].

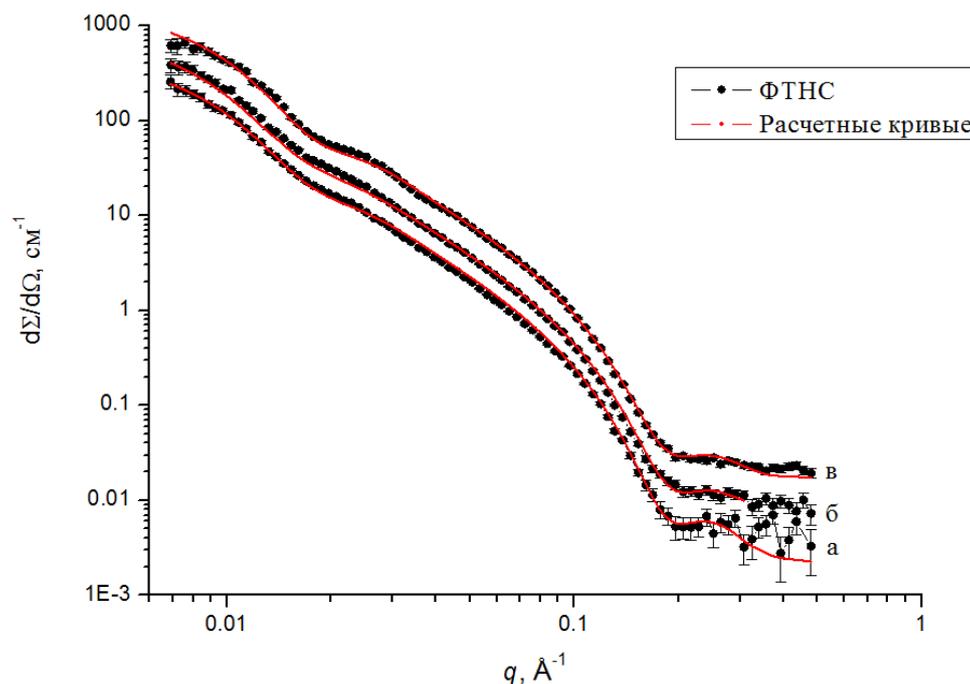
Наиболее подходящими методами исследования ФТНС являются малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР). [4,5]

Эксперименты методом МУРН были выполнены на реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна)[6], методом МУРР на синхротронном источнике КИСИ (НИЦ "Курчатовский институт", Москва).

В представленной работе описаны спектры от фосфолипидной транспортной наносистемы, измеренные на синхротронном и нейтронном источниках, при различной концентрации ФТНС в воде. Определены основные структурные параметры везикулы ФТНС.

Показано, что однородное приближение хорошо описывает спектры МУРН, в то время МУРР плохо поддаются описанию в области Гинье. Это связано с особенной плотностью распределения длины рассеяния нейтрона и фотона в направлении нормали к липидному бислою.





Расчетные и экспериментальные кривые МУРН на образцах везикул ФТНС с концентрациями: а - 5%, б - 10%, в - 25%, в водных растворах мальтозы с концентрациями мальтозы: 20%, 25%, 30%, соответственно.

Работа выполнена при финансировании РНФ, грант 14-12-00516

1. Арчаков А.И., Гусева М.К., Учайкин В.Ф., и др. // Пат. 2463057, Российская Федерация, МПК А61К 31/685 А61К 9/127 А61К 1/16 В82В 1/00.
2. Kiselev M.A., Zemlyanaya E.V., Ipatova O.M., et al. // Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 2015 V. 114, P. 288.
3. Ipatova O.M., Torkhovskaya T.I., Medvedeva N.V., et al. // Biomedical Chemistry. 2010. V. 4. P. 82.
4. Киселев М.А. // ЭЧАЯ. 2011. V. 42. P. 578.
5. Свергун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 276 с.
6. Kuklin A. I., Islamov A. K., Gordeliy V. I. Scientific reviews: Two-detector system for small-angle neutron scattering instrument //Neutron News, 2005 T. 16, №. 3, С. 16-18.



Определение фрактальной размерности геометрических фракталов с помощью оптического Фурье преобразования

Е. Г. Яшина^{1,2}, Э. О. Быков^{1,2}, П. М. Пустовойт^{1,2}, М. Д. Матасов²,
С. В. Григорьев^{1,2}

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

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

Основным параметром, свидетельствующим о том, что та или иная структура, представляет собой фрактал, является размерность Хаусдорфа [1]. Изучая фрактальные структуры, необходимо определить эту размерность. Для определения фрактальной размерности объектов субмикронных размеров реализована методика малоуглового рассеяния нейтронов, синхротронного и рентгеновского излучения [2]. В основу этого метода положен закон зависимости интенсивности рассеянного излучения от волнового числа переданного импульса $I(Q) = A Q^{-D}$, где показатель степени равен фрактальной размерности D .

Для структур, имеющих размер от микрона и более необходимо использовать более длинноволновое, оптического диапазона, электромагнитное излучение. Использовано три схемы проведения эксперимента, в которых как источник света использовался лазер, а оптическая линза выполняет преобразование Фурье [3]. На детекторе, который находится в фокальной плоскости, наблюдается Фурье-образ объекта, расположенного на пути лазерного луча. Если объект, помещённый в оптическую схему, имеет фрактальную геометрию, то из полученного спектра можно легко найти фрактальную размерность структуры [4].

Для различных типов фракталов выполнены эксперименты при разных уровнях самоподобия одного и того же генератора фрактального объекта. Изучены одномерные и двумерные геометрические фракталы, такие как стержни Кантера, ковер Серпинского и др.

6. В. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York (1983).
7. J. Teixeira J. Appl. Cryst. 21 (1988), 781-785
8. Дж. Гудмен, Введение в Фурье-оптику, Москва (1970), Гл.5, 116-124
9. С. Allain, M. Cloitre, Phys.Rev.B 33, 5 (1986)



Концепция нейтронного рефлектометра ЛИРА с зеркальным отклонителем пучка для исследования жидких систем

В. Г. Сыромятников

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

В докладе рассмотрена концепция время-пролетного нейтронного рефлектометра ЛИРА с зеркальным отклонителем пучка для исследования жидких систем. Данный рефлектометр планируется создать для реактора ПИК. Зеркальный отклонитель пучка – система немагнитных $NiMo/Ti$ суперзеркал ($m = 5$). Отклонитель пучка позволяет работать в диапазоне по переданному импульсу $Q_z = (0.005 \div 0.4) \text{ \AA}^{-1}$ при отражении пучка от образца сверху и в диапазоне по переданному импульсу $Q_z = (0.005 \div 0.25) \text{ \AA}^{-1}$ при отражении пучка от образца снизу. В обоих случаях образец располагается горизонтально и при переходе от отражения пучка сверху к отражению снизу он не перемещается. Используемый в установке спектр нейтронов $\lambda = (2 \div 10) \text{ \AA}$. Максимальное сечение пучка, падающего на образец - $4 \times 100 \text{ мм}^2$. В вертикальной плоскости пучок, падающий на образец, фокусируется. В рефлектометре планируется использование как неполяризованных, так и поляризованных нейтронов. В последнем случае будет реализована схема полного поляризационного анализа, включающая в себя новый компактный трансмиссионный поляризатор [1], два спин-флиппера, широкоапертурный веерный анализатор, магнит образца и систему ведущих магнитных полей от поляризатора до образца и от образца до анализатора. В качестве прерывателя нейтронного пучка планируется использовать прерыватель нового типа [2], который позволяет формировать спектр пучка и устранять вклад длинноволновых нейтронов.

1. V.G. Syromyatnikov, V.M. Pusenkov. Journal of Physics: Conference Series **862** (2017) 012028.
2. V.G. Syromyatnikov. The Proceedings of International Conference on Neutron Optics (NOP 2017) in the Physical Society of Japan Conference Proceedings, 2017.



Сингулярное разложение в структурных исследованиях нуклеопротеидных комплексов методом времязрешённого малоуглового рентгеновского рассеяния

*Т. А. Черемных^{1,2}, А. В. Швецов¹, R. Dattani³, Н. В. Клопов¹,
Д. В. Лебедев¹, А. Л. Коневега¹, В. В. Исаев-Иванов¹*

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

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

³ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

В структурно-функциональных биофизических исследованиях для изучения кинетики молекулярных процессов в макромолекулярных комплексах необходимо высокое разрешение по времени. Времязрешённое малоугловое рентгеновское рассеяние (ВР-МУРР) является методом, позволяющим фиксировать конформационные изменения и измерять кинетику биомacroмолекулярного комплекса в близких к нативным условиям с хорошим временным разрешением. Экспериментальный анализ ВР-МУРР проводился методом сингулярного разложения (SVD) для двух бактериальных макромолекулярных систем, ответственных за синтез белка и гомологичную рекомбинацию. SVD используется для определения минимального количества элементов, необходимых для восстановления набора данных, тогда как данные собираются с изменением условий эксперимента.

Анализ наборов спектров TR-SAXS, полученных в ходе эксперимента с использованием метода сингулярного разложения, показал, что конформационные изменения в наших биомacroмолекулярных системах, наблюдаемые как в измерениях стационарных состояний комплексов, так и в исследуемых процессах, можно описать путем изменения нескольких различных компонент спектра. Так были определены характерные времена для процессов и получены их кинетические параметры.

Таким образом, сингулярное разложение позволяет свести изменения спектров рассеяния к очень ограниченному числу характерных компонент. Затем можно проанализировать кинетику исследуемых процессов, выявив характерные времена изменений структуры биомacroмолекулярных комплексов.



МУРомец 2017, Гатчина, 20 - 22 сентября 2017 г.

Установка ультрамалоуглового рассеяния на реакторе ИР-8

М. Н. Шушунов, Е. В. Яковенко

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Представлен двухкристальный дифрактометр для малоуглового рассеяния тепловых нейтронов, работающий на горизонтальном канале ГЭК-9 реактора ИР-8 в НИЦ КИ (Москва). В дифрактометре используются совершенные монокристаллы кремния (111) в параллельной позиции (1,-1). Рабочая длина волны нейтронного излучения $1,54 \text{ \AA}$, шаг вращения кристалла-анализатора $0,126^\circ$, ширина инструментальной кривой FWHM 3° . При мощности реактора 6 МВт и поперечном сечении нейтронного пучка $15 \times 15 \text{ мм}^2$ пиковая скорость счёта на инструментальной кривой составляет 200 н/с, уровень фона 0,06 н/с. Диапазон измеряемых длин векторов рассеяния $0,0035 - 0,175 \text{ нм}^{-1}$, соответствующий диапазон размеров неоднородностей $0,036 - 2 \text{ мкм}$.





УЧАСТНИКИ





Angelov Borislav	Institute of Physics, ELI beamlines, AVCR	99
Eckerlebe Helmut	Helmholtz-Zentrum Geesthacht	81
Kraan Wicher	Delft University of Technology (retired)	91
Wolff Maximilian Peter	Uppsala University	-
Абасзаде Рашад Габил	НАН Азербайджана	-
Авдеев Михаил Васильевич	Объединенный институт ядерных исследований	39
Азарова Любовь Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	103
Аксельрод Леонид Абрамович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Алигулиева Хаяла Вагиф	Институт физики НАН Азербайджана	-
Алтынбаев Евгений Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	34
Антропов Николай Олегович	Институт физики металлов УрО РАН	41
Байрамуков Виктор Юрьевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Быков Эдуард Олегович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Быков Алексей Анатольевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	26
Вальковский Глеб Андреевич	Санкт-Петербургский государственный университет	-
Васильев Андрей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Гаврилов Сергей Викторович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Глушкова Татьяна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Голубев Михаил Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Горшкова Юлия Евгеньевна	Объединенный институт ядерных исследований	53
Градов Олег	Институт энергетических проблем химической физики РАН	-



Григорьев Сергей Валентинович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	31
Григорьева Наталья Анатольевна	Санкт-Петербургский государственный университет	-
Губанова Надежда Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Диденко Геннадий Петрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Дмитриев Иван Дмитриевич	Московский государственный университет	105
Дубицкий Илья	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	107
Дьячков Максим	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Егоров Владимир Валерьевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Забенкин Владимир Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Зобкало Игорь Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Иванова Ирина Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Ипатов Дмитрий	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Киселев Михаил Алексеевич	Объединенный институт ядерных исследования	49
Ковалев Анатолий Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	109
Коник Петр Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Копица Геннадий Петрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	73
Коршунов Артём Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Кравцов Евгений Алексеевич	Институт физики металлов УрО РАН	-
Краснов Игорь Аркадьевич	IEAR Uni-Kiel	59
Кульвелис Юрий Викторович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	65
Курбаков Александр Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-



Кучугура Мария Дмитриевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Ларичев Юрий Васильевич	Институт катализа СО РАН, Новосибирский государственный университет	77
Лебедев Василий Тимофеевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	71
Лебедев Виктор Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Лебедев Дмитрий Витальевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Литвин Василий Сергеевич	Институт ядерных исследований РАН	82
Лихолетова Елена	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Малышев Александр Леонидович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Маслова Варвара Андреевна	Объединенный институт ядерных исследований	111
Матасов Максим Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Матвеев Василий Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Матвеева Анна Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Мистонов Александр Андреевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	23
Москвин Евгений Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Набиев Асиф Араслы	Объединенный институт ядерных исследований	101
Нагорная Татьяна	Объединенный институт ядерных исследований	69
Никова Екатерина Сергеевна	Институт физики металлов УрО РАН	45
Ноговицына Татьяна Андреевна	Уральский федеральный университет	25
Овсяников Александр Константинович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Окороков Алексей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-



Павлов Константин	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Петров Николай Владимирович	Университет ИТМО	61
Петрова Анита Олеговна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Плешанов Николай Константинович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	95
Повзнер Александр Алексадрович	Уральский федеральный университет	-
Поташев Станислав Ильич	Институт ядерных исследований РАН	85
Пустовойт Полина Марковна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	113
Пшеничный Кирилл Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	33
Рунов Владимир Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Рунова Маина Константиновна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Рябухина Марина Викторовна	Институт физики металлов УрО РАН	40
Савицкая Наталья Евгеньевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	27
Саламатов Юрий Александрович	Институт физики металлов УрО РАН	43
Сафиулина Ирина Альбертовна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-
Сжогина Алина Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Смирнов Александр Витальевич	Университет ИТМО	83
Смыслов Руслан Юрьевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	55
Стерлягова Анна Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Суясова Марина Вадимовна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	67
Сыромятников Владислав Генрихович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	96, 114



Тавторкина Татьяна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Тарнавич Владислав	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Томчук Александр Васильевич	Объединенный институт ядерных исследований	60
Ульянов Владимир Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Фрейман Виталий Максимович	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Цвигун Наталья Викторовна	Институт кристаллографии РАН	75
Черемных Таисия	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	115
Чубова Надежда	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Швецов Алексей Валерьевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	51
Шишкин Иван Сергеевич	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	89
Шушунов Михаил	НИЦ «Курчатовский институт»	-
Юзвюк Мария Херардовна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ	-
Юркевич Оксана	Балтийский федеральный университет	-
Яковенко Екатерина Владимировна	НИЦ «Курчатовский институт»	116
Яшина Екатерина Геннадьевна	НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Санкт-Петербургский государственный университет	-





