



**Конференция по использованию
рассеяния нейтронов
в конденсированных средах**

РНИКС-2018

**Сборник тезисов
и список участников**

**17–21 сентября 2018 г.
Санкт-Петербург, Россия**



**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»**

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

**Конференция
по использованию рассеяния нейтронов
в конденсированных средах
РНИКС-2018**

17 – 21 сентября 2018 г.
Санкт-Петербург, Россия

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ
И СПИСОК УЧАСТНИКОВ**

УДК 538.9

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников Конференции по использованию рассеяния нейтронов в конденсированных средах РНИКС-2018 (17 – 21 сентября 2018 г., Санкт-Петербург).

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the Conference on Neutron Scattering in Condensed Matter NSCM-2018 (17-21 of September, 2018, St. Petersburg).

Сборник подготовлен Е.С. Лихолетовой.

Поддержано грантом РФФИ № 18-32-10032.

Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2018

Программный комитет

Председатель: И.А. Митропольский (СПбГУ, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

В.Л. Аксенов (ОИЯИ, НИЦ «Курчатовский институт»)

П.А. Алексеев (НИЦ «Курчатовский институт»)

М.В. Авдеев (ОИЯИ)

А.М. Балагуров (ОИЯИ)

Г.Д. Бокучава (ОИЯИ)

С.Б. Вахрушев (ФТИ РАН)

В.В. Волков (ИК РАН)

В.В. Воронин (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

С.В. Григорьев (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

А.Г. Гукасов (ЛЛБ-Сакле)

Ф.С. Джебпаров (НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ)

А.С. Иванов (ИЛЛ-Гренобль)

А.И. Иоффе (ЮЦНН-Мюнхен)

М.А. Киселев (ОИЯИ)

Е.А. Кравцов (ИФМ УрО РАН)

Д.П. Козленко (ОИЯИ)

А.И. Курбаков (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

С.А. Куликов (ОИЯИ)

Т.В. Кулевой (НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ)

Д.В. Лебедев (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

С.В. Малеев (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

А.И. Окороков (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

А.Н. Пирогов (ИМФ УрО РАН)

Н.К. Плешанов (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Р.А. Садыков (ИЯИ РАН)

Б.П. Топерверг (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

В.Т. Эм (НИЦ «Курчатовский институт»)

Организационный комитет

Сопредседатель: Н.А. Григорьева (СПбГУ)

Сопредседатель: С.В. Григорьев (СПбГУ, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Заместитель председателя: Е.С. Лихолетова (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

А.И. Васильев (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Н.Н. Губанова (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

М.А. Голубев (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

А.Н. Матвеева (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Д.О. Сканченко (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

О.В. Усманов (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Н.М. Чубова (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

М.Х. Юзвюк (НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

E-mail: WorkshopOIKS@pnpi.nrcki.ru

<https://oiks.pnpi.spb.ru/events/rniks2018>

Организаторы и спонсоры



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



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



Санкт-Петербургский государственный университет
<https://spbu.ru/>



Объединенный институт ядерных исследований
<http://www.jinr.ru/>



ООО «Центр Межрегионального
Инновационного Развития»
<http://inno-mir.ru/>



SwissNeutronics AG
<https://www.swissneutronics.ch/>



Российский фонд фундаментальных исследований. Программа «Конкурс проектов 2018 года организации российских и международных молодежных научных мероприятий, проводимый РФФИ», соглашение о гранте 18-32-10032 мол_г.
<http://www.rfbr.ru>



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

ОГЛАВЛЕНИЕ

Пленарные доклады.....	9
------------------------	---

Устные доклады

Сессия 1.	Кристаллические структуры и элементарные возбуждения.....	13
Сессия 2.	Некристаллические материалы, полимеры и жидкости....	23
Сессия 3.	Фундаментальные исследования с нейтронами.....	35
Сессия 4.	Магнитные структуры и взаимодействия.....	43
Сессия 5.	Биологические системы.....	55
Сессия 6.	Теоретические аспекты рассеяния нейтронов.....	71
Сессия 7.	Источники нейтронов.....	79
Сессия 8.	Магнетизм и поляризованные нейтроны.....	85
Сессия 9.	Сильно коррелированные электронные системы.....	99
Сессия 10.	Приборы и методики нейтронного эксперимента.....	107
Сессия 11.	Функциональные материалы, материаловедение и прикладные исследования (энергетика, окружающая среда, геофизика, культурное наследие).....	121
Сессия 12.	Поверхности, тонкие плёнки и многослойные структуры..	135
Сессия 13.	Методы исследования вещества, комплементарные нейтронному рассеянию.....	147

Стеновые доклады

Сессии стеновых докладов.....	161
The School «Neutron Scattering in Condensed Matter Physics».....	231
Список участников.....	247



SCIENCE

Пленарные доклады

SCIENCE

SCIENCE

Перспективы развития источников нейтронов в России

В. Л. Аксенов^{1, 2}

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*«Нас никто не может упрекнуть
в том, что у нас хорошие помыслы»
(В. С. Черномырдин, газета «Известия»
09.04.2004 г.)*

Перспективы развития нейтронных исследований в России связаны с реактором ПИК в Гатчине, о котором будет доклад В. В. Воронина. Поэтому я о другом – как обеспечить эффективное использование этого мощного источника. Для этого нужно, в первую очередь, активное научное сообщество, а также дополнительные источники нейтронов.

Дополнительных источников у нас в стране мало, среди них наиболее оборудованный и широко используемый – это реактор ИБР-2 в Дубне, который входит в четверку ведущих импульсных источников в мире (доклад Д. П. Козленко). Ресурс ИБР-2 заканчивается в 2037 г. Остальные источники в России закончат свое существование еще раньше. Нужны источники компактные, средних потоков, а также один высокопоточный импульсный, комплементарный реактору ПИК.

Современные высокопоточные источники (стационарные реакторы ИЛ, ПИК, источники на ускорителях SNS, ESS и пульсирующие реакторы в Дубне) достигли своего технологического предела в получении потоков нейтронов. Чтобы выйти за них, нужны новые решения. Представлены обсуждаемые в литературе новые проекты. В развитие идей пульсирующих реакторов предложена концепция нейтронного супербустера четвертого поколения, драйвером которого может служить ускоритель протонов или электронов [1]. Расчеты показывают, что можно ожидать на выходе плотность потока тепловых нейтронов в импульсе до 10^{17} см⁻²·с⁻¹ и в среднем до 2×10^{14} см⁻²·с⁻¹. Длительность импульса нейтронов может быть 200–300 и 20–30 мкс от различных замедлителей при соответствующих длительностях импульсов от ускорителя.

Обсуждается научная программа для реактора ПИК, и для нового источника, которая, во-первых, ориентирована на проблемы, решение которых невозможно без нейтронов и, во-вторых, имеет элементы комплементарности.

1. В. Л. Аксенов, Е. П. Шабалин, Поверхность. РСНИ, № 7, (2018).

Кристаллизации в живых клетках - путь к бессмертию? Малоугловое рассеяние, рентгеновская дифракция и криоэлектронная микроскопия в исследовании феномена

Э. В. Штыкова

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

Система адаптивной устойчивости к повреждающим воздействиям сформировалась в биосфере задолго до современного антропогенного давления. Живые клетки, бактерии, вирусы, споры под воздействием стресс-факторов (голодания, облучения, обезвоживания, экстремальных температур и других) переходят в состояние покоя и могут сохранять жизнеспособность тысячи лет. Выживание происходит за счет процесса внутриклеточной кристаллизации комплексов ДНК со специфическими, гистоноподобными белками. Функция последних состоит в защите генетического материала как от собственно стресс-фактора, так и от окислительных процессов, сопровождающих любые виды стрессорных воздействий. Несмотря на то, что этот феномен был открыт более века назад, механизмы ответа живой материи на дисбаланс клеточной энергии и процессы перехода клеток в анабиоз и последующего выхода из него попрежнему остаются малоизученными.

В докладе будут представлены современные данные по изучению различными структурными методами процессов кристаллизации в живых клетках и показаны последние результаты исследования этого важного явления с помощью малоуглового рассеяния, рентгеновской дифракции и криоэлектронной микроскопии. Особое внимание будет уделено проблеме различия процессов биокристаллизации *in cellulo* и *in vitro* и методам интерпретации полученных структурных данных.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства научных организаций (соглашение № 007-ГЗ/ЧЗЗ63/26) в части «структурные исследования комплексов ДНК» и Российского фонда фундаментальных исследований (проект КОМФИ №17-00-00487) в части «структурные исследования гистоноподобных белков».

Сессия 1.
***Кристаллические структуры и
элементарные возбуждения***

Кристаллическая и магнитная структура упорядоченных и неупорядоченных магнитных оксидов $\text{PbFe}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$: данные нейтронной дифракции

*Б. К. Аргымбек¹, С. Е. Кичанов¹, Д. П. Козленко¹, В. Хлан²,
Е. В. Лукин¹, Б. Н. Савенко¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Карлов университет в Праге, Прага, Чехия*

Среди исследуемых материалов современной физики конденсированных сред особое место занимают соединения на основе оксидов железа со структурным типом перовскита. Эти материалы обладают широким спектром структурных и магнитных свойств в зависимости от температуры или высоких давлений. Одним из интересных свойств этих оксидов $\text{PbFe}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ являются упорядочение и разупорядочение магнитных и парамагнитных ионов в кристаллической решетке.

В докладе представлены результаты исследований кристаллических и магнитных структур оксидов железа со структурным типом перовскита $\text{PbFe}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ в широком температурном диапазоне с использованием нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 ИБР-2 в ОИЯИ в Лаборатории нейтронной физики им. Франка.

Кристаллическая структура упорядоченного перовскита $\text{PbFe}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}\text{O}_3$ описывается тетрагональной симметрией $I4/m$, в которой атомы железа и сурьмы чередуются между собой. При низкой температуре возникает появление магнитных пиков, которые соответствуют формированию антиферромагнитной фазы с вектором распространения $\mathbf{k} = [1/2, 1/2, 0]$. Обсуждаются структурные механизмы образования этой магнитной фазы.

В неупорядоченном перовските $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ наблюдается появление антиферромагнитного упорядочения G-типа при низких температурах. Представлены параметры кристаллической решетки, длины связей, магнитные моменты железа для этого соединения и обсуждают модели кристаллических и магнитных структур, образующихся в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ на основе экспериментальных данных.

$\alpha \rightarrow \gamma$ фазовый переход в железе: результаты *in situ* нейтронного дифракционного эксперимента

А. М. Балагуров^{1, 2}, И. А. Бобриков¹, И. С. Головин³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

Проведены нейтронные дифракционные исследования структурного $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода ($T_c \approx 911^\circ\text{C}$) в образцах чистого железа, находящихся в разном исходном состоянии. В литом железе в области $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения наблюдается аномальное исчезновение дифракционной картины. При повторных нагревах литого образца этот эффект становится менее выраженным, а при нагреве порошка железа он отсутствует (рис.). Обосновано предположение, что наблюдаемые эффекты связаны с образованием в ходе перехода паракристаллических кластеров малых размеров с большой дисперсией параметров ячейки. Кинетика образования кластеров замедлена в литых образцах, что и приводит к временному исчезновению дифракционной картины. Эти результаты (частично опубликованные в [1]) позволяют по-новому представить процессы, происходящие на атомном уровне в ходе $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода в железе.

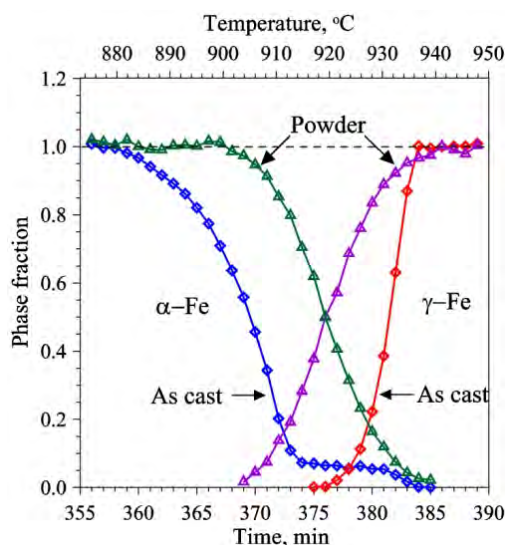


Рис. Зависимости от времени содержания α - и γ -фаз в образцах литого (*As cast*, ромбы) и порошкового железа (*Powder*, треугольники) при их нагреве со скоростью $2.2^\circ\text{C}/\text{мин}$. Указаны шкала времени (внизу) и температуры (вверху). Для порошка Fe сумма содержания α - и γ -фаз во всем интервале близка к единице. Для литого железа сумма фаз в середине интервала не превышает 0.1.

Нейтронные эксперименты выполнены на реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна) при финансовой поддержке РФФИ (проект РФФИ_а 18-02-00325).

1. А.М. Балагуров, И.А. Бобриков, И.С. Головин, Письма в ЖЭТФ 107, 583-589 (2018)

Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру лантан-стронциевых манганитов

*Н. М. Белозерова¹, Д. П. Козленко¹, С. Е. Кичанов¹, Е. В. Лукин¹, Z. Jirak²,
Б. Н. Савенко¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт физики, Прага, Чехия

Перовскитоподобные манганиты $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ проявляют большое разнообразие свойств в зависимости степени легирования и размера частиц.

Такие соединения широко используются в производстве магнитных устройств для записи и хранения информации, суперчувствительных датчиков магнитного поля и температуры [1]. Поскольку размер частиц имеет важное значение в формировании свойств манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$, особое внимание привлекли к себе наноструктурированные манганиты, как многообещающие соединения для биомедицинских применений [2].

Помимо ряда потенциальных применений, манганиты $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ привлекательны для большого числа научных исследований. Знания о связи между поведением магнитной структуры и поведением кристаллической структуры в наноструктурированных манганитах, которые могут быть получены из исследований при высоких давлениях, очень важны для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в таких соединениях [1].

Недавно было открыто что наноструктурированные манганиты $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \sim 0.33$) имеют ромбоэдрическую структуру, как и соответствующие образцы с микронным размером частиц. Однако, магнитная структура таких соединений изучена мало, в противоположность к изученным манганитам с микронной структурой, которые проявляют ферромагнитное состояние [1, 2].

Кристаллическая и магнитная структура наноструктурированных манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ исследована с помощью нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высоко-поточного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна) с использованием камер высокого давления с сапфировыми наковальнями под давлением до 5.7 ГПа.

Во всех образцах ферромагнитное (ФМ) упорядочение формируется близко к комнатной температуре, а при понижении температуры $T < 270$ К появляется дополнительная антиферромагнитная (АФМ) фаза А-типа. При высоком давлении доля АФМ фазы возрастает в то время, как доля ФМ сильно уменьшается. Структурные аспекты магнитного фазового расслоения и влияние высокого давления на исследуемые наноструктурированные манганиты обсуждается. Барические зависимости параметров кристаллической структуры, магнитных моментов ФМ и АФМ фазы, температуры Кюри и Нееля рассчитаны.

1. D.P. Kozlenko, B.N. Savenko, High-pressure effects on the crystal and magnetic structure of managanites, Phys. Part. Nuclei. 37: S1 (2006).

2. M. Kačenka, O.Kaman, Z.Jirák and et al, Journal of Solid State Chemistry, V. 221 (2015) 364–372.

Локальная атомная структура и свойства сегнетоэлектрических материалов после механоактивации

*Г. Б. Сухарина, А. М. Ермакова, Н. Ю. Смоленцев, Е. В. Глазунова,
Е. И. Ситало, В. В. Срабионян, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Сегнетоэлектрики со структурой перовскита являются перспективными материалами, используемыми в различных электронных устройствах. Одной из наиболее важных задач при их производстве является создание материалов с заданными свойствами. Методы механоактивации позволяют влиять на электрофизические свойства материалов, поскольку способствуют накоплению структурных дефектов [1,2]. Данная работа посвящена изучению локальной атомной структуры и электрофизических свойств сегнетоэлектрических материалов после механоактивации, реализованной разными способами.

Исследование структурных изменений в сегнетоэлектрических материалах после механоактивации проводили с использованием эффективных экспериментальных и теоретических методов, таких как рентгеновская спектроскопия поглощения и рентгеновская дифракция, а также компьютерного моделирования. Изученные сегнетоэлектрические образцы $\text{PbNb}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{PbCo}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ были синтезированы методом твердого синтеза, а механоактивация выполнена на основе двух разных способов: (1) – активация синтезированных образцов в наковальнях Бриджмене при различных давлениях и фиксированной величине сдвиговой деформации; (2) - активация синтезированных образцов в мельнице AGO -2. Также был проведен сравнительный анализ физических величин, характеризующих структурное состояние исследуемых материалов до и после механоактивации. Исследования влияния механоактивации на электрофизические свойства сегнетоэлектрических материалов были исследованы в широком диапазоне частот и температур.

Данное исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант 16-32-00589 mol_a.)

1. S .P. Kubrin, I .P. Raevski, V.V.Stashenko, A. A. Gusev, V.P. Isupov, et al., Springer Proceedings in Physics Volume 193, Pages 155-165(2017)
2. A.A.Gusev, S.I. Raevskaya, V.V.Titov, et.al. Ferroelectrics, Vol.496, Issue 1, 231-239 (2016)

Динамика решетки в системах с иерархией взаимодействий и кластерной структурой

Д. А. Серебренников¹, Е. С. Клементьев¹, П. А. Алексеев^{2,3}

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

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

³ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

В работе исследованы решеточные свойства каркасно-кластерных систем - высших боридов и интерметаллидов, в которых можно выделить кластеры сильно связанных атомов. В рамках разработанного подхода для количественного описания фононных спектров и термодинамических свойств кластеры заменялись на суператома. В работе использовались собственные и литературные данные по законам дисперсии и плотности фононных состояний для ряда додекаборидов и гексаборидов редкоземельных элементов, 4d металлов, интерметаллидов основе 4f и 5d элементов, алюминия и никеля (см. [1,2] для высших боридов). В качестве объектов исследования выбирались бинарные системы с разным соотношением масс элементов и сильным различием силовых констант межатомных взаимодействий, с преобладанием ковалентного либо металлического типа связи. Решеточные возбуждения измерялись на времяпролетных и трехосных нейтронных спектрометрах.

Удалось выяснить роль сильной иерархии взаимодействий между атомами внутри кластера и прочими атомами, иерархии масс элементов. Дискриминация систем производилась по возможности разделения фононного спектра на низкочастотную часть и высоко-лежащие моды, наличию протяженных плоских участков на дисперсионных кривых фононов, ярко выраженных пиков в низкоэнергетической части фононного спектра (квазилокальных мод). Исследована роль различия числа степеней свободы в модели суператома и модели на основе истинной кристаллической структуры на описание термодинамических свойств, определен температурный (энергетический) интервал применимости разрабатываемого модели для описания решеточной теплоемкости. Оказалось, что температурный интервал для модели суператома значительно шире, чем для модели Эйнштейновских осцилляторов, при помощи которой часто описывают квазилокальные моды в кристаллах.

Тем самым удалось значительно продвинуться в разработке подхода, позволяющего находить и количественно описывать системы с кластером-суператомом как реальным физическим объектом, формирующим свойства системы, а не просто структурным мотивом, условно выделяемым в структуре как геометрический объект.

Работа была поддержана грантом РФФИ 18-32-00583-мол-а.

1. D.A.Serebrennikov, E.S.Clementyev, P.A.Alekseev, Journal of Alloys and Compounds 726 (2017) 323.

2. П.А. Алексеев, Успехи физических наук 185 (2015) 353.

Нейтронное дифракционное исследование новой структурной формы треугольного антимоната $MnSb_2O_6$

*М. Д. Кучугура^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, В. Б. Налбандян³, А. Ю. Никулин³,
Г. В. Раганян⁴, Е. А. Зверева⁴*

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

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

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

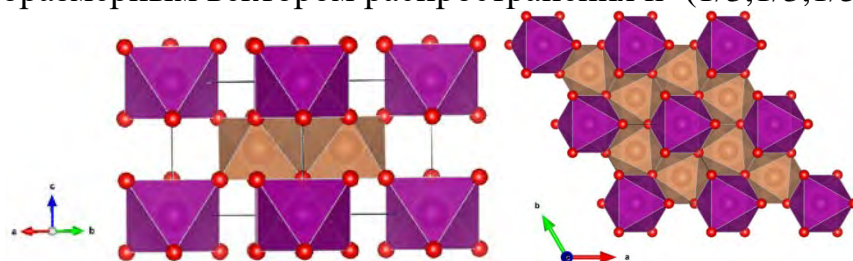
⁴ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

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

Измерения нового $MnSb_2O_6$ проводились в Мюнхене на дифрактометре SPODI ($\lambda = 1.545 \text{ \AA}$) при T от 4 до 300 К. Температура Нееля для данного образца 9 К. Обработка экспериментальных данных по методу Ритвельда подтвердила однофазность стехиометрического состава и позволила описать детали кристаллической структуры (рис.).

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

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



*Кристаллическая
структура
тригонального
(P-31m) $MnSb_2O_6$*

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00297.

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

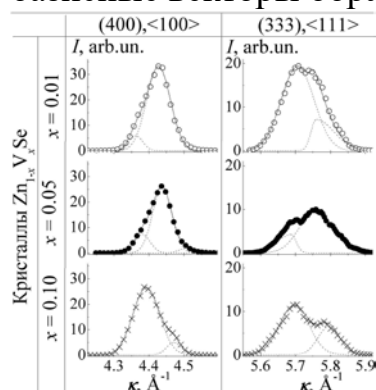
**Развитие неоднородно-деформированного состояния
в структуре легированных 3d- ионами кубических кристаллов
халькогенидов цинка по мере повышения содержания примеси
с сильным дестабилизирующим влиянием**

В. И. Максимов, Е. Н. Максимова, Т. П. Суркова, В. Д. Пархоменко

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

Легированные магнитоактивными ионами кристаллы ZnB^{VI} ($B^{VI} = O, S, Se, Te$) – разбавленные магнитные полупроводники [1], интересны своими необычными электронными свойствами и закономерностями их формирования. В настоящей работе методом рассеяния тепловых нейтронов охарактеризована при комнатной температуре реальная структура объёмных кристаллов $Zn_{1-x}M_xS(Se)$ с 3d-примесями $M = V, Cr, Fe, Co, Ni$, которые даже в малых количествах сильно дестабилизируют исходную решётку. Эксперимент выполнен на двухосевом дифрактометре Д76 (реактор ИВВ-2М, г. Заречный).

Изменения в подсистеме атомных смещений с достижением уровней легирования $x \sim 0.010 \div 0.100$ в исследованных кристаллах ведут к яркому проявлению аномалий на профилях структурных пиков в радиальных направлениях (см. рисунок), из анализа которых получены сведения о результирующем поле микродеформаций. Выявлена слабо выраженная зависимость модулей относительных деформаций от концентрации легированных 3d- ионов. С обнаружением дополнительных узлов $q = (1/3 \ 1/3 \ 1/3) \ 2\pi/a$ (a – параметр кубической ячейки), структурное состояние предлагается рассматривать как предпереходное к трансформации ГЦК-ГПУ, подразумевающей переходы из ГЦК- решётки по 8-ми лучевой звезде $k_5 = \mu(b_1 + b_2 + b_3)$, где b_1, b_2, b_3 – базисные векторы обратной решётки, а $\mu \approx 1/3$.



Картинки нейтронной дифракции кристаллов $Zn_{1-x}V_xSe$, измеренные в радиальных направлениях относительно узлов (400) и (333)

Работа выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания ФАНО России по теме «Поток» № АААА-А18-118020190112-8.

1. T. Dietl, H. Ohno, Rev. Mod. Phys. 86, 187 (2014).

Влияние изменений атомного объема на фононный спектр FeSi

П. П. Паршин¹, А. И. Чумаков^{1, 2}, П. А. Алексеев^{1, 3}, К. С. Немковский⁴,
Л. Дубровинский⁵, А. Кантор^{2, 5}, Й. Перссон⁶, Р. Рюффер²

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Росси

² European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

³ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

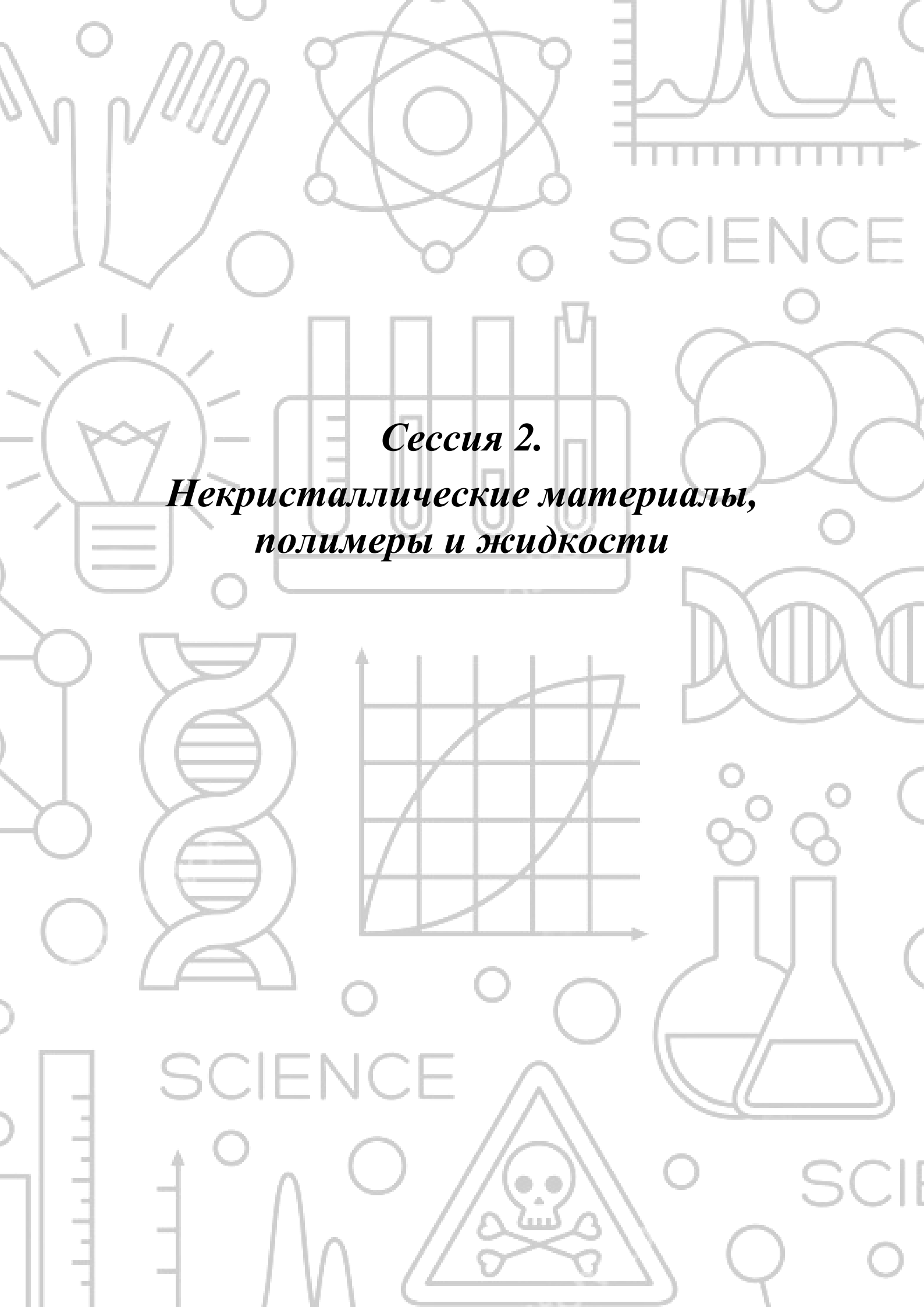
⁴ Jülich Centre for Neutron Science at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Forschungszentrum Jülich GmbH, Garching, Germany

⁵ Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Bayreuth, Germany

⁶ Jülich Centre for Neutron Science and Peter Grünberg Institut, Jülich, Germany

Детально проанализированы результаты экспериментального исследования эволюции спектра тепловых колебаний атомов железа в моносилициде FeSi в зависимости от двух внешних параметров – температуры (диапазон $T=46 - 297$ К, при $P=0.1$ МПа) и давления ($P=0.1$ МПа – 43 ГПа, при $T=297$ К), полученные методом ядерного неупругого рассеяния синхротронного излучения. Установлено, что уменьшение атомного объема, при понижении температуры или при увеличении давления, сопровождается перестройкой фононного спектра, которая проявляется, в частности, в расщеплении низкоэнергетического пика в спектре, и в увеличении энергий всех фононов. Проведен анализ изменения средней по спектру энергии колебаний атомов железа и энергии Дебая при уменьшении атомного объема. Рассмотрены варианты изменения электронного спектра FeSi, которые позволяют объяснить обнаруженные фононные аномалии.

Работа частично поддержана грантами РФФИ 14-02-00272а, РФФИ 14-22-01002 ОФИ_м и РНФ 16-12-10065.



Сессия 2.

***Некристаллические материалы,
полимеры и жидкости***

On the silicone rubber elastomer matrix microstructure

M. Balasoiu^{1, 2}, M. Bunoiu³, I. Bica³, D. Soloviov^{1, 4}

¹ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

² *“Horia Hulubei” National Institute of Physics and Engineering, Bucharest, Romania*

³ *West University of Timisoara, Department of Electricity and Magnetism, Timisoara, Romania*

⁴ *Institute for Safety Problems of Nuclear Power Plants of the Ukrainian NAS, Kyiv, Ukraine*

Magnetic elastomers (ME's) are specific classes of smart substances composed from elastomer matrices filled with ferromagnetic nanoparticles responding in a complex way to the changes of external conditions.

The synthesis and the study of structure and physical properties of these “smart” materials combining the functional properties of elastic polymers and ferromagnetic substances should be considered as a perspective way to provide the understanding on the construction principles of a wide class of materials for electronics, electrical engineering, medicine, aero and cosmic industries.

Earlier investigations have analyzed, by means of small-angle neutron scattering method, subtle structural features of the polymeric matrix and the ensemble of embedded ferroparticles as resulting from the conditions of preparation of ferroelastomers by the variation of ferroparticle concentration and the strength of a transversal external magnetic field applied during polymerization [1, 2, 3, 4].

Due to the increasing of the scattering intensity for the matrix with the decrease of scattering vector, effects of the structural arrangements of the particle assemblies inside the matrix are not evident at scattering vectors smaller than 0.4 nm^{-1} .

For decreasing the elastomer matrix scattering intensity, the synthesis procedure was changed and the microstructure properties of several elastomeric matrices were investigated by means of SANS.

RO-JINR Projects Nos. 323/21.05.2018 and 322/21.05.2018 item71 are acknowledged.

1. M. Balasoiu, V.T. Lebedev, D.N. Orlova, I. Bica, Crystallography Reports 56(7), 93-96 (2011).

2. M. Balasoiu, I. Bica, Yu.L. Raikher, E.B. Dokukin, L. Almasy, B. Vatzulik, A.I. Kuklin, Optoelectronics and Advanced Materials – Rapid Communications, 5(5), 523-526 (2011).

3. M. Balasoiu, V.T. Lebedev, I. Bica, Yu.L. Raikher, in „Actual problems of condensed matter physics”, Ed. Yu.M. Raikher, ISBN 978-5-7691-2418-1, Perm, 106-115 (2015) (Russ.)

4. M. Balasoiu, V.T. Lebedev, Yu. L. Raikher, I. Bica, M. Bunoiu, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 431 126-129 (2017).

Исследование фрактальных свойств ксерогелей диоксида циркония

Л. А. Азарова^{1, 2}, Н. Н. Губанова^{1, 3}, Г. П. Копица^{1, 3}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, В. Пупич⁴,
Х. Э. Ёров⁵, 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 Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴ JCNS at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ) Forschungszentrum Jülich GmbH, Garching, Germany

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

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 и ультрамалоуглового рассеяния нейтронов определены параметры мезоструктуры ксерогелей диоксида циркония, синтезированных золь-гель методикой, при различных значениях рН и их эволюция на разных стадиях термической обработки. Установлено, что частицы аморфного диоксида циркония, формируют структуру поверхностного фрактала. Оказалось, что наиболее разветвленной структурой обладают образцы при рН=4,5. Показано, что с повышением температуры отжига, в общем случае, фрактальная размерность практически не меняется, а размер частиц уменьшается.

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).

Структура и взаимодействие в водных мицеллярных растворах анионных ПАВ при добавлении полиэтиленгликоля

*А. П. Артикульный^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 2}, М. В. Авдеев², Л. Алмаши³,
А. И. Иваньков¹, Л. А. Булавин²*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Центр физических исследований им. Вигнера, Будапешт, Венгрия

Мицеллярные системы анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) олеата натрия (SO) и додецилбензолсульфонатной кислоты (DBSA) используются для создания двухслойного стабилизирующего покрытия магнитных наночастиц водных феррожидкостей. Так, физико-химические свойства мицеллярных систем оказывают влияние на структурную организацию агрегатов магнитных частиц в водных феррожидкостях [1]. Для увеличения биосовместимости феррожидкостей в систему часто добавляют полимер полиэтиленгликоль (PEG). Такая многокомпонентная система с мицелл-полимерным буфером имеет тенденцию к реорганизации агрегатов магнитных частиц [2]. Настоящая работа посвящена исследованию структурных параметров и межмицеллярного взаимодействия в растворах SO и DBSA при добавлении водорастворимого нейтрального полимера PEG разной молекулярной массы.

С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) проведены структурные исследования мицеллярных систем ПАВ-полимерных комплексов. Используя данные поверхностного натяжения и МУРН, получены следующие параметры мицелл: число агрегации, степень ионизации, морфология мицеллы и обратная длина экранировки для различных составов смешанных растворов. Из анализа концентрационных зависимостей полученных параметров для различных соотношений ПАВ/полимер и для разной молекулярной массы PEG (1- 20 кДа) было установлено, что ПАВ-полимерные комплексы имеют квазисферическую форму, большую степень ионизации (до 25%) и большее значение длины обратного экранирования по сравнению с системами со свободными мицеллами. Следует отметить, что аналогичный эффект экранирования для систем SO-PEG 1 кДа наблюдался ранее [3].

1. Petrenko V.I. Artykulnyi O.P. et al., Coll. Surf. A. 541 (2018) 222.

2. Avdeev M.V. et al., J. Appl. Cryst. 43, 5 (2010).

3. Petrenko V.I. Avdeev M.V. et al., Coll. Surf. A. 480 (2015) 191.

Супрамолекулярные гели на основе литохолевой кислоты и ее производных

Ю. Е. Горшкова¹, M. D. Ossowska-Chrusciel², A. Rudzki², W. Zajac³

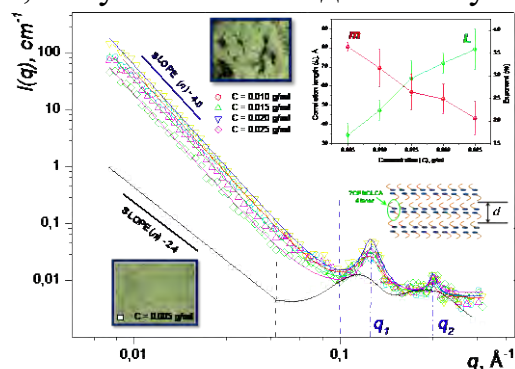
¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Siedlce University of Natural Sciences and Humanities, Institute of Chemistry, Siedlce, Poland

³ Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland

Супрамолекулярные гели - гели, образованные из низкомолекулярных гелирующих агентов (*от англ.* low molecular mass organic gelators, LMOG), - актуальный объект исследования в последние годы, поскольку они могут быть альтернативным биоматериалом полимерным гелям. Потенциальное применение супрамолекулярных гелей в области медицины: доставка лекарств, тканевая инженерия [1], а также в фотоэлектронике [2] связано с их чувствительностью к изменению физических (температура, свет, ультразвук) и химических (наличие катионов и анионов в среде) параметров [3].

В работе обсуждается морфология и внутренняя структура супрамолекулярных гелей на основе литохолевой кислоты и ее производных, синтезированных впервые. Молекулы литохолевой кислоты (ЛХК, 3 α -моноокси-5 β -холановая кислота, C₂₄H₄₀O₃) способны образовывать в различных растворителях самоорганизующиеся системы с помощью водородных связей. Так, например, в диметилсульфоксиде (ДМСО) ЛХК и ее производная 4-гептилоксифенил-литохолевая кислота формируют фибриллы или радиальные сферолиты, ламели которых состоят из димеров, как следует из данных, полученных методом малоуглового рассеяния нейтронов [4].



Кривые МУРН (символы) с аппроксимацией (линии) для 4-гептилоксифенил-литохолевой кислоты в ДМСО-d₆ при концентрациях C = 0.005, 0.010, 0.015, 0.020 и 0.025 г / мл при T = 10 °C после одного цикла нагревания-охлаждения.

Модификация карбонильной и гидроксильной групп литохолевой кислоты приводят к формированию стабильного супрамолекулярного геля в ДМСО и этаноле, состоящего из нанотрубок, толщина стенок которых соответствует длине молекулы производной ЛХК (C₅₀H₇₂O₆S).

Работа выполнена в рамках научной программы Польша-ОИЯИ (пр. №284, п. 13 от 26.04.2018).

1. M. Reches, Adv. Mater. 18, 1365(2006).

2. C. Yu, Langmuir. 30(5), 1257 (2014).

3. G. Yu, Soc. Rev. 42, 6697 (2013).

4. M. Ordon, Y. Gorshkova, M.D.Ossowska-Chrusciel, Thermochemica Acta, 643, 1 (2016).

Морфология монолитных аэрогелей наноструктурированного оксигидроксида алюминия

А. Н. Ходан¹, А. А. Осипов², Г. П. Копица^{3, 4}, Х. Э. Ёров⁵, А. Е. Баранчиков⁶, В. К. Иванов^{6, 7}, А. Feoktystov⁸, V. Pipich⁸

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

² *АО «ГНЦ РФ – Физико-энергетический институт им. А. И. Лейпунского», Обнинск, Россия*

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

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

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

⁶ *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

⁷ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

⁸ *JCNS, Forschungszentrum Jülich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany*

Окисление металлического Al на воздухе в присутствии Hg, приводящее к образованию рыхлых оксидов, известно давно [1]. Продуктом такого окисления является наноструктурированный оксигидроксид алюминия (НОА), характеризующийся волокнистой структурой и крайне низкой плотностью (~ 0.01 г/см³), что позволяет отнести его к аэрогелям на основе одномерных структур. К настоящему времени разработаны различные методы синтеза НАО с использованием сплавов Al-Hg, Al-Ga, Al-Bi и жидкого Al [2], однако, механизм формирования фибрилл НОА при селективном окислении Al на поверхности жидкометаллической фазы до сих пор остается совершенно неизученным.

Данная работа посвящена изучению структуры, в том числе структурной анизотропии, НОА, формирующихся в виде монолитных материалов при окислении поверхности жидкометаллического раствора Al в Hg [3], а также поверхности жидких сплавов Al-Ga и Al-Bi в воздушной среде с контролируемой температурой (20 ÷ 400 °С) и влажностью. Методами РФА, ТГА/ДТА, ПЭМ, низкотемпературной адсорбции азота, МУРН и УМУРН, а также МУРР проведены комплексные исследования как исходных образцов НОА, так и отожженных при 400 ÷ 1150 °С.

Установлено, что структура монолитных НОА может быть описана в рамках трехуровневой модели, включающей в себя наличие первичных неоднородностей ($r_c \approx 9\text{--}19$ Å), формирующих фибриллы (радиус поперечного сечения $R \approx 36\text{--}43$ Å и длиной $L \approx 3200\text{--}3300$ Å) или ламели (толщина $T \approx 110$ Å и ширина $W \approx 3050$ Å), которые, в свою очередь, объединены в крупномасштабные агрегаты ($R_c \approx 1.25\text{--}1.4$ мкм) с незначительной шероховатостью поверхности. Показано, что высокая удельная площадь поверхности (~ 200 м²/г), характерная для исходных НОА, сохраняется при его отжиге до 900 °С, а в результате термической обработки при 1150 °С происходит ее уменьшение до ~ 100 м²/г в результате спекания фибрилл.

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

1. Wislicenus H. // Z. Chem. Ind. Kolloide. 1908. В. 2. S. XI.

2. M. R. Noordin, K. Y. Liew, Synthesis of Alumina Nanofibers and Composites, in: A. Kumar (Ed.), Nanofibers, InTech, 2010

3. A. N. Khodan, G. P. Kопitsa, Kh.E. Yorov, et al. Journal of Surface Investigation, 2018, Vol. 12, No. 2, pp. 287–296.

Применение нейтронно-активационного анализа для детектирования углеродных нанотрубок в сложном биологическом матриксе

Е. С. Кормазева^{1, 2}, А. А. Анциферова^{1, 3}, И. А. Бухтеева⁴

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

² *ФГБУ ГНЦ ФМБЦ им. А. И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия*

³ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

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

В связи с быстрым развитием нанотехнологий и внедрением в различные отрасли индустрии наноматериалов, растет востребованность также и нанообъектов на основе углерода, в частности, углеродных нанотрубок (УНТ). Вместе с тем, это обуславливает потенциальный риск для здоровья людей, которые вступают в непосредственный контакт с данными продуктами наноиндустрии.

Одним из важнейших аспектов изучения влияния нанообъектов на организм является разработка методов их детектирования в составе биологических тканей. В случае УНТ, это весьма затруднительно, поскольку углерод является основным химическим элементом в составе биологических организмов. На сегодняшний день для изучения биораспространения УНТ в организме используется метод радиоактивных индикаторов, т.е. предполагается предварительная обработка самих УНТ. Радиоактивная метка создается либо путем облучения протонами [1], что безусловно влияет на целостность структуры УНТ, либо путем создания функциональной оболочки из хорошо активируемых соединений методами радиохимии, что может повлиять на физико-химическое взаимодействие с биоматерией [2].

В данной работе предлагается методика, которая не предполагает предварительного облучения УНТ: этот факт дает возможность исследования биологических проб человека. При производстве УНТ в качестве катализатора используются редкоземельные металлы, в частности, молибден. Даже после очистки определенное количество атомов катализатора остается «встроенными» в структуру нанотрубки. Молибден обладает большим значением сечения захвата тепловых нейтронов, удобными значениями периода полураспада и энергии гамма-излучения, а также его естественное содержание в организме довольно мало, что позволяет успешно применять нейтронно-активационный анализ для получения количественных значений содержания УНТ в составе биологической пробы. По предварительным расчетам, данная методика позволяет выявить в биологической ткани УНТ с 0,5% содержанием по массе молибдена, что свидетельствует о ее высокой чувствительности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках гранта № 18-32-00252.

1. N. Gibson, U. Holzwarth, et al., Arch Toxicol. 85 (2011).

2. H. Ali-Boucetta, K. Kostarelos, et al., Advanced Drug Delivery Reviews. 65 (2013).

**Механизм структурирования поверхностно-активных мономеров
в растворах по данным рассеяния нейтронов**

В. Т. Лебедев, Ю. В. Кульвелис, И. М. Дубовский, Д. Н. Орлова

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

Потребности синтеза новых полимеров, высокоупорядоченных на масштабах нано- и микрометров, стимулируют поиск способов специальной упаковки мономеров, например, в сферические, цилиндрические мицеллы, чтобы в ходе последующей полимеризации (сшивания) мономеров зафиксировать готовые структуры [1]. При этом важно знать физические условия и формы структурной организации мономеров перед полимеризацией.

Упорядочение мицеллообразующего мономера (n-додециламмония 2-акриламидо-2-метилпропан сульфоната) в воде анализировалось с помощью малоуглового рассеяния нейтронов при содержании мономера $C = 0.005-0.25$ моль/л. ниже и выше порога образования мицелл ($C^* \sim 0.01$ моль/л).

При подходе к критической точке ($C < C^*$) обнаружено образование малых агрегатов (пары, четверки), интегрированных в разреженные гелеобразные структуры (~ 20 молекул), прекурсоры сферических мицелл, наблюдаемых при $C > C^*$.

Из анализа корреляций мономеров по данным рассеяния нейтронов найдены закономерности молекулярной сборки и область концентраций, в которой завершается разделение фаз, в результате чего числа агрегации для мицелл достигают предельных значений ~ 130 .

Результаты нейтронных экспериментов раскрывают механизм структурирования мономеров, позволяя надежно интерпретировать ранее полученные данные кондуктометрии, визкозиметрии, атомно-силовой микроскопии [1] и представить картину упорядочения мономеров в целом, что важно для технологий синтеза полимеров с заданной структурой и функциональными свойствами.

Работа поддержана именованным грантом Губернатора Ленинградской области.

1. A. Yu Bilibin, T. M. Shcherbinina, N. V. Girbasova, V. T. Lebedev, Yu V. Kulvelis, V. S. Molchanov, I. M. Zorin. Colloidal properties of polymerizable counterion surfmers solutions based on alkylamino 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonates in different solvents. // Designed Monomers and Polymers, 2016 VOL. 19, NO. 5, 369–380.

Наноструктуры в полимерных многокомпонентных системах

В. С. Молчанов, А. Л. Квятковский, А. В. Шibaев, О. Е. Филиппова

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

Современные полимерные многокомпонентные системы привлекают внимание исследователей как адаптивные или умные системы, способные к перестроению структуры и изменению свойств под воздействием внешних факторов или небольших изменений состава системы. Механизм изменения структуры системы обычно реализуется через влияние на физические взаимодействия: гидрофобные, электростатические, магнитные и т.д. Этим объясняется и полная обратимость процессов перестроения наноструктур [1]. Одним из важнейших методов, позволяющих проводить неразрушающие эксперименты, и независимо получать информацию о нескольких компонентах системы, является малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН).

Ярким примером применения метода МУРН для наноструктурированных систем является исследование растворов на основе полимерных цепей и червеобразных мицелл поверхностно-активных веществ. Это гибкие цилиндрические мицеллы, достигающие в длину десятков микрон при поперечном размере 4-6 нм. Такие мицеллярные цепи подобно полимерным способны переплетаться в растворе с образованием трехмерной сетки и придавать им уникальные вязкоупругие свойства [2-5]. При добавлении углеводов происходит разрушение сетки и резкий переход к низковязкой ньютоновской жидкости за счет образования капель микроэмульсии вместо червеобразных мицелл [2,6,7]. Такая восприимчивость мицелл к добавлению углеводов оказалась практически важной, и стала основой для применения систем в нефтедобывающей промышленности.

При создании совместных систем двух типов цепей главным препятствием было то, что сильное электростатическое или гидрофобное взаимодействие между полимером и червеобразными мицеллами приводило к разрушению последних. Задача была решена при помощи двух подходов: использованных гидрофобно модифицированных водорастворимых полимеров [1,2], которые встраивались в мицеллы только боковыми группами, и использование водонерастворимых линейных полимеров [8,9], которые были локализованы в области близкой к опушке мицелл и не разрушали их, но способствовали их разветвлению.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 17-13-01535)

1. V.S. Molchanov, O.E. Philippova, J. Colloid Interface Sci. 394, 353 (2013).
2. V.S. Molchanov, O.E. Philippova, A.R. Khokhlov, et al., Langmuir 23, 105 (2007).
3. V.A. Pletneva, V.S. Molchanov, O.E. Philippova, Langmuir 31, 110 (2015).
4. V.S. Molchanov, V.A. Pletneva, I.A. Klepikov, **RSC Adv.** 8, 11589 (2018).
5. A.L. Kwiatkowski, V.S. Molchanov, A.S. Orekhov, et al., J. Phys. Chem. B 120, 12547 (2016).
6. A.V. Shibaev, M.V. Tamm, V.S. Molchanov, Langmuir 30, 3705 (2015).
7. A.V. Shibaev A.V., V.S. Molchanov, O.E. Philippova, et al., J. Phys. Chem. B 119, 15938 (2015).
8. A.L. Kwiatkowski, H. Sharma, V.S. Molchanov, et al., Macromolecules 50, 7299 (2017).
9. A.L. Kwiatkowski, V.S. Molchanov, H. Sharma, et al., Soft Matter 23, 4792 (2018).

**Пористые наноматериалы на основе углерода допированные Au и Co:
состав, структура и магнитные свойства**

*В. А. Рыжов¹, E. Lähderanta², A. V. Lashkul², А. И. Курбаков³, В. В. Мамвеев³,
М. В. Мокеев⁴, П. Л. Молканов¹, И. А. Киселев¹, Д. М. Галимов⁵, К. G. Lisunov²*

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

² *Department of Mathematics and Physics, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland*

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

⁴ *Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия*

В последнее время в пористых стеклообразных материалах на основе углерода экспериментально обнаружены необычные магнитные свойства, включая ферромагнитное (ФМ) поведение в области комнатной температуры, что вызывает большой интерес. Появление ФМ свойств в них обычно объясняют образованием беспорядка/дефектов в исходном материале, или присутствием магнитных примесей, сопровождающееся образованием магнитных кластеров с ближним ФМ порядком. В данной работе исследовались структура, состав и магнитные свойства подобных материалов допированных немагнитным Au (0.004% по массе, S-Au) и «магнитным» Co (0.117% по массе, S-Co), Нейтронная дифракция показала их аморфную структуру, а также присутствие дальнего магнитного порядка при низких T в S-Co образце. Твердотельные ЯМР спектры водорода и углерода (^{13}C) показали, что наши образцы состоят из фрагментов ароматических и алифатических органических соединений, что указывает на присутствие многочисленных внутренних дефектов с вероятными свойствами парамагнитных (ПМ) центров. Исследования магнитных свойств (статической намагниченности, ЭПР и продольного нелинейного отклика на слабое ac магнитное поле) S-Au показали, что ФМ кластеры существуют в магнитной матрице, испытывающей ФМ упорядочение при понижении температуры, и взаимодействуют антиферромагнитно (АФМ) с окружающими магнитными центрами. Присутствие АФМ корреляций ФМ кластеров и матрицы приводит к отсутствию роста намагниченности образцов как в критической ПМ T -области матрицы, так и в процессе доменообразования, ниже ее T_C . В последнем случае это связано с образованием необычных «доменов», включающих фрагмент матрицы и окружающие его ФМ кластеры. При этом отсутствие роста магнитно-статической энергии образца обеспечивается близкой к противоположной ориентацией моментов матрицы и кластеров. Дальнейшее понижение T приводит к возрастающей скошенности этих моментов, т.е. к образованию своеобразного «скошенного ферромагнитного» состояния S-Au. В S-Co образце подобный сценарий разыгрывается выше комнатной температуры. Ниже 350 К, его состояние не меняется вплоть до низких T . При низких температурах (3 и 10 К для S-Au и S-Co) оба образца показывают тенденцию к переходу «порядок-порядок» от «скошенного ферромагнетика» к ФМ упорядочению, что характерно для негейзенберговских магнитных материалов.

Исследование эволюции структуры пористого SiO₂, полученного методом темплатного золь-гель синтеза, на разных стадиях термической обработки

*А. Г. Иванова¹, Н. В. Цвигун², М. С. Масалович¹, О. А. Загребельный¹,
Г. П. Копица^{1,3}, Т. М. Хамова¹, О. А. Шилова¹,
Ю. Е. Горшкова⁴, А. Е. Баранчиков⁵, V. Pipich⁵*

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

² *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

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

⁴ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

⁶ *Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany*

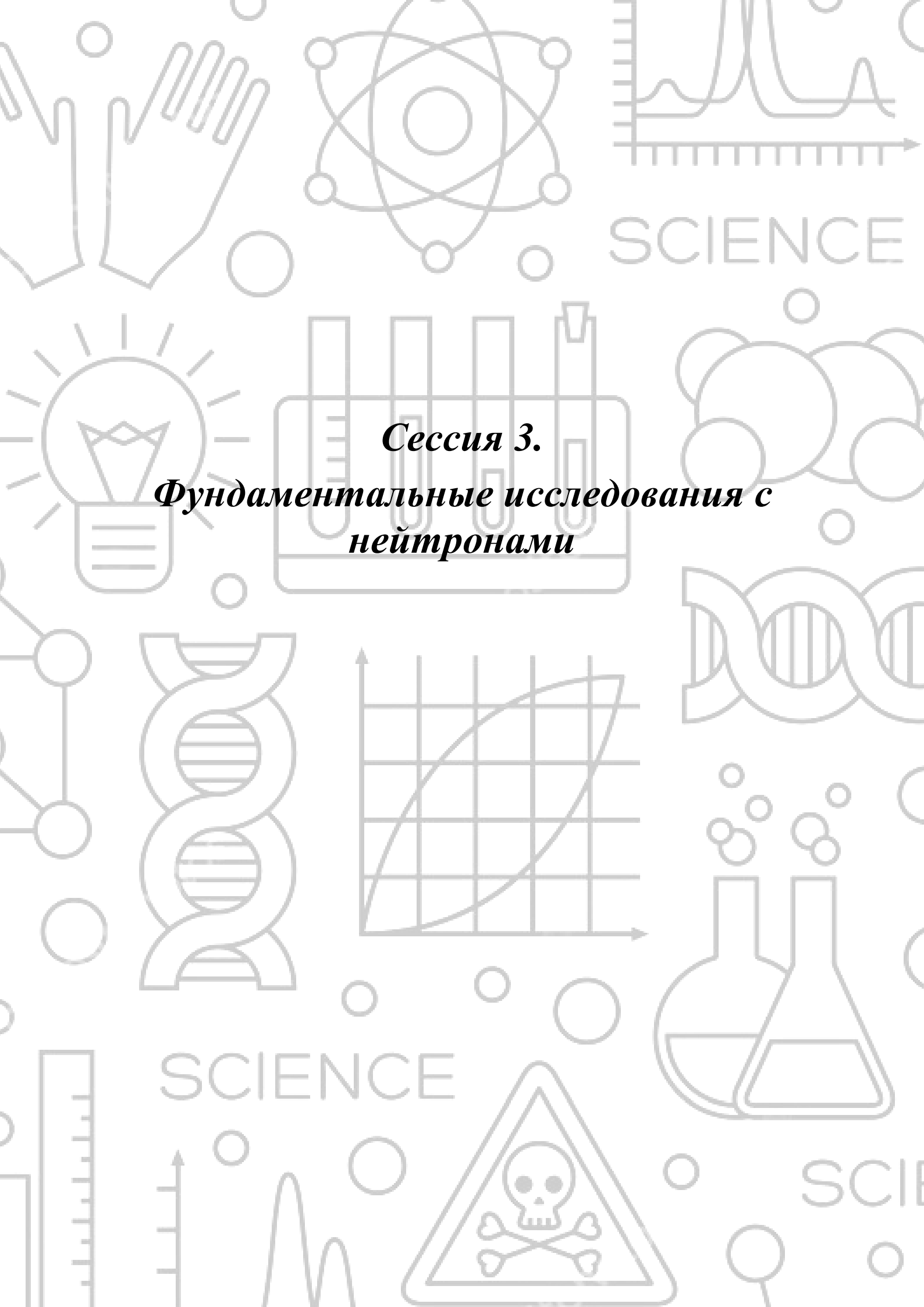
Композитные материалы на основе оксидов MnO₂, Co₃O₄, Fe₂O₃ и др. являются перспективными для электродов электрохимических устройств таких как псевдоконденсаторы и микробиологические топливные элементы, вследствие их высокой электро- и каталитической активности. В ряде работ [1,2] показано, что использование SiO₂ в качестве матрицы для данных материалов приводит к их более высокой электрохимической стабильности. В тоже время, установлено [3], что электрохимические свойства электродов, в состав которых входит SiO₂ напрямую зависят от способа его синтеза и морфологии поверхности.

Настоящая работа посвящена изучению структуры, пористого SiO₂, полученного методом темплатного золь-гель синтеза, как компонента электрода электрохимического устройства. В качестве прекурсора использовался тетраэтоксисилан (ТЭОС). Кислотный гидролиз ТЭОС осуществляли в водной среде. В качестве темплата использовался полиэтиленгликоль (ПЭГ) с разной молекулярной массой, которая варьировалась от 2000 до 10000. Методами РФА, ТГА/ДТА, СЭМ, УМУРН и МУРН, а также низкотемпературной адсорбции проведены комплексные исследования как исходных образцов SiO₂-ПЭГ, так и изотермически отожженных при температурах от 500 до 700 °С.

Выявлено, что полученные кремнеземные порошки являются рентгеноаморфными с удельной площадью поверхности S_{уд} от 50 до 750 м²/г. Анализ структуры порошков показал наличие микронных шарообразных образований, сформированных из плотно уложенных пористых гранул. Из экспериментальных сечений рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ нейтронов получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния и определены характерные размеры R_c гранул SiO₂, а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-03-01201 А.

1. S.-H. Ryu et al. Bulletin of the Korean Chemical Society, 2011, 32, 2683-2688
2. A.M. Goma et al. Journal of Solid State Electrochemistry, 2014, 18, 2505-2512.
3. K.C. Leonard et al. Electrochim Acta, 2011, 56, 10137-10144



SCIENCE

***Сессия 3.
Фундаментальные исследования с
нейтронами***

SCIENCE

SCIENCE

Осциллирующий образец для эксперимента по изучению взаимодействия нейтронной волны с веществом, движущимся с экстремальным ускорением

А. И. Франк, С. В. Горюнов, Г. В. Кулин, Н. В. Реброва, М. А. Захаров

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Для эксперимента по изучению взаимодействия нейтронной волны с веществом, движущимся с экстремальным ускорением, необходим образец, удовлетворяющий определенным требованиям. В эксперименте предлагается обнаружить отклонение от потенциального закона дисперсии для нейтрона [1,2].

В качестве образца предлагается использовать пьезоэлектрический резонатор с нанесенным на его поверхность трехслойной структурой. Внутри этого образца будет распространяться объемная акустическая волна (ОАВ). Вещество в таком образце может достигать ускорения величины порядка $10^5 g$ на частотах ультразвукового диапазона. Основная проблема в создании такого образца синфазное движение плоской поверхности резонатора. Для изучения колебаний поверхности создан прибор - сканирующий лазерный интерферометрический виброметр. Представляются результаты измерений поверхности резонаторов см. рис. 1. Рассматриваются способы достижения синфазного движения поверхности резонатора. А также представлены результаты исследования этих способов в Comsol Multiphysics см. рис. 2.

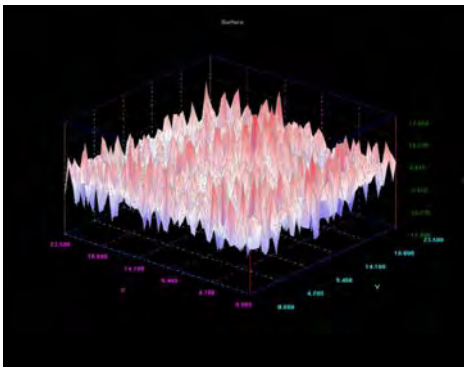


Рис. 1. Топография поверхности кварцевого резонатора, колеблющегося на частоте 2.1 МГц

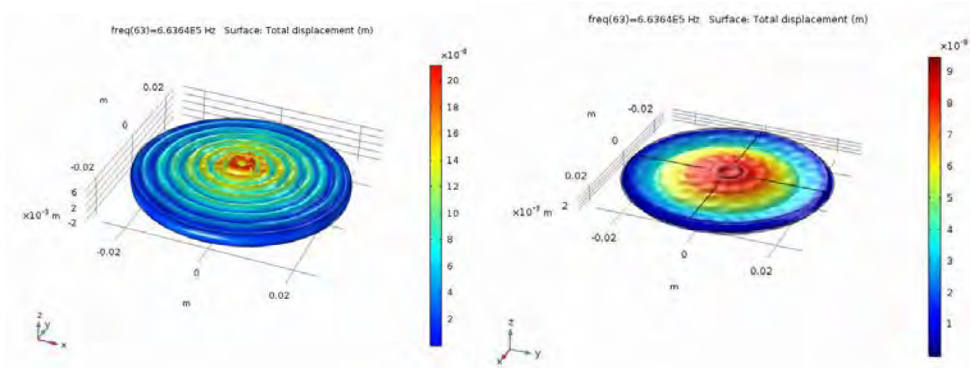


Рис. 2. Результат расчета карты смещений PZT диска без фазки (слева) и с фазкой (справа) на резонансной частоте 663 кГц

1. A.I. Frank, D.V. Kustov, G.V. Kulin et al., JOP: Conf. Series 746 (2016)
2. Frank A.I., JETP Lett. 100 (2014) 613я

Кинетика переноса поляризации в неупорядоченной системе ядер ${}^8\text{Li}$ - ${}^6\text{Li}$ в монокристалле LiF

А. Д. Гулько, Ф. С. Джемпаров, Д. В. Львов, А. Н. Тюлюсов

*Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Исследована фундаментальная проблема случайных блужданий в статически неупорядоченных средах на примере размешивания ядерной поляризации бета-активных ядер (бета-ядер) ${}^8\text{Li}$ по примесной системе ядер, образованной бета-ядрами и стабильными ядрами ${}^6\text{Li}$, содержащимися в монокристалле LiF с контролируемой концентрацией $c \leq 0.1$. Ядра ${}^8\text{Li}$ получали в реакции ${}^7\text{Li}(\bar{n}, \gamma){}^8\bar{\text{Li}}$ на тепловых поляризованных нейтронах. Процесс инициировался магнитными диполь-дипольными взаимодействиями и состоял в переносе поляризации с первично поляризованного ядра ${}^8\text{Li}$ на ближайшие (стабильные) ядра ${}^6\text{Li}$ и в дальнейшей миграции поляризации по ядрам ${}^6\text{Li}$ с возможным возвратом на ядра ${}^8\text{Li}$. Изменение поляризации ядер ${}^8\text{Li}$ определялось по асимметрии их бета-излучения относительно внешнего магнитного поля H_0 . Процесс исследован вплоть до выхода на диффузионную асимптотику. Концентрация примеси ${}^6\text{Li}$ варьировалась от 3% до 10%, а поле H_0 изменялось от 200 G до 1200 G.

По сравнению с предыдущим исследованием [1] увеличена точность численного Монте-Карло-моделирования процесса за счет увеличения статистики, и при аппроксимации результатов этого моделирования (для последующего сопоставления с экспериментом) применены предельно реалистические аналитические выражения, гарантирующие получение точного результата в главном порядке по концентрации (без использования континуального приближения). Показано, что микроскопическая теория удовлетворительно согласуется с полученными экспериментальными результатами практически без привлечения подгоночных параметров.

1. Ю.Г. Абов, А.Д. Гулько, Ф.С. Джемпаров, О.Н. Ермаков, Д.В. Львов, А.А. Любарев. Ядерная физика **77**, 721 (2014).

Коррекция концепции псевдопотенциала Ферми для задач динамической дифракции

Ф. С. Джепаров

*Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Псевдопотенциал Ферми [1-4] заменяет сильное взаимодействие $V(r)$ медленного нейтрона со связанным ядром на такой потенциал $V_\varepsilon(r) = -\frac{2\pi}{m} f_0 \delta_\varepsilon(r)$, который при $f_0 = f$ дает правильную амплитуду s -рассеяния в первом борновском приближении. Здесь $\delta_\varepsilon(r) = \frac{3}{4\pi\varepsilon^3} \mathcal{G}(r < \varepsilon)$, f – амплитуда рассеяния, $\mathcal{G}(x)$ – функция Хэвисайда, а ε – радиус псевдопотенциала. Вклад второго приближения $\delta f = 6f^2 / (5\varepsilon) + ikf^2 + O(k^2\varepsilon^2)$ считается пренебрежимым при $|f| \ll \varepsilon \ll \lambda = k^{-1}$, и уравнение Шредингера с взаимодействием $V_\varepsilon(r)$ применяется там, где невозможно ограничиться первым борновским приближением. При этом, в одноволновом варианте, когда нейтрон в диамагнитном веществе с плотностью n описывается плоской волной $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, получается, что $k^2 = k_0^2 + 4\pi n f$, где \mathbf{k}_0 – импульс в вакууме, а с учетом оптической теоремы $\text{Im } f = \frac{k}{4\pi} \sigma$, в типичных условиях с $k_0^2 \ll 4\pi n |f|$ и в пренебрежении движениями в среде, входной I_0 и прошедший I потоки нейтронов для пластины с небольшой толщиной l связаны соотношением $I = I_0 \exp(-n\sigma l)$, где $\sigma = 4\pi |f|^2$ – полное сечение, что верно для аморфных сред. Однако, в нейтронной интерферометрии [5] в мнимую часть f_0 феноменологически включают только поглощение нейтронов. По-видимому, это различие обусловлено тем, что в кристалле нейтрон движется в поле периодического потенциала, и упругое когерентное рассеяние ведёт к образованию блоховских волн, а не к простому выбыванию нейтронов из пучка. Для согласования этих разных подходов и единого описания всех процессов динамической дифракции, достаточно включить в антиэрмитову часть f_0 только поглощение нейтронов, но учитывать высшие по $V_\varepsilon(r)$ члены при пренебрежении всем, что зависит от ε . В результате воспроизводятся как уравнения теории многократного рассеяния и соотношения для аморфных сред, в которые входит полная амплитуда рассеяния, так и зонное движение в периодическом потенциале, поскольку для кристалла мнимая часть сдвига энергии второго приближения не будет содержать сечение когерентного упругого рассеяния.

1. И.И. Гуревич, Л.В. Тарасов. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
3. В.В. Федоров. Нейтронная физика. СПб.: Изд-во ПИЯФ, 2004.
4. M. Utsuro, V.K. Ignatovich. Handbook of Neutron Optics. WILEY-VCH Verlag, 2010.
5. H. Rauch, S.A. Werner. Neutron Interferometry. Oxford Univ. Press. 2015.

Взаимодействие ультрахолодных нейтронов с осциллирующим в пространстве нейтронным интерференционным фильтром

М. А. Захаров, А. И. Франк, Г. В. Кулин, С. В. Горюнов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Проведено численное исследование задачи о взаимодействии ультрахолодных нейтронов (УХН) с осциллирующим в пространстве нейтронным интерференционным фильтром по типу Фабри-Перо [1]. В задаче рассматривалась эволюция волнового пакета путём численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера методом расщепления оператора эволюции.

Данная проблематика имеет как практический интерес в качестве теоретически-расчётного сопровождения экспериментов по изучению взаимодействия нейтронов с веществом, движущимся с ускорением [2], так и собственный научный интерес. Изучение нестационарных квантовых явлений является одним из фундаментальных направлений исследований в нейтронной оптике. К подобным задачам можно отнести расщепление энергетического спектра нейтронов при взаимодействии с осциллирующим потенциалом [3, 4], или, например, при взаимодействии с движущейся дифракционной решёткой [5].

В работе исследованы свойства осциллирующего фильтра как квантового модулятора потока УХН, особенности результирующего спектра и волновой функции в зависимости от параметров системы.

1. A.I. Frank, S.V. Balashov, V.I. Bodnarchuk, et al., Proc.SPIE 3767, 360 (1999).
2. A. I. Frank, D.V., Kustov, G.V. Kulin, et al., J. Phys. Conf. Ser. 746, 012054 (2016).
3. J. Felber, R. Gähler, C. Rausch and R. Golub, Phys. Rev. A. 53, 319 (1996).
4. A. Pimpale, S. Holloway and R. J. Smith, J.Phys.A: Math.Gen. 24, 3533 (1999).
5. G.V. Kulin, A.I. Frank, S.V. Goryunov, et al., Phys. Rev. A 93, 033606 (2016).

Нейтронные волны в ускоряющейся среде

А. И. Франк

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В конце прошлого века было предсказано, что частота световой волны, прошедшей через преломляющий образец, движущийся с ускорением отличается от начального значения. Позже аналогичное явление было предсказано и для нейтронных волн. Впоследствии было осознано, что речь идет об очень общем волновом явлении – получившем название Эффект ускоряющегося вещества.

Для света это эффект столь мал, что несмотря на фантастическую чувствительность оптических методов, он, по-видимому, до сих пор не наблюдался. Однако соответствующие нейтронно-оптические эксперименты оказались возможными и были поставлены с ультрахолодными нейтронами (УХН) в 2007-2011 годах. Было продемонстрировано, что энергия УХН, прошедших через преломляющий образец, двигающийся с ускорением, действительно меняется. Хотя изменение энергии составляло величину всего лишь порядка 10^{-10} эВ, оно было измерено с разумной точностью и результаты оказались в хорошем согласии с теорией, основанной предположении, что закон дисперсии нейтронных волн в ускоряющемся веществе тот же, что и для неподвижного вещества. Это предположение считалось очевидным.

Недавно была выдвинута гипотеза о неприменимости обычной теории дисперсии в случае движения среды с ускорением, превышающем некоторую критическую величину, и сделана полукачественная оценка величины такого критического ускорения. Справедливость этой гипотезы должна быть предметом экспериментальной проверки и соответствующие эксперименты готовятся.

**Поиск новых межнуклонных взаимодействий
в рассеянии нейтронов на ядре**

В. В. Воронин^{1, 2, 3}, И. А. Кузнецов², Д. Д. Шапиро^{1, 2}

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

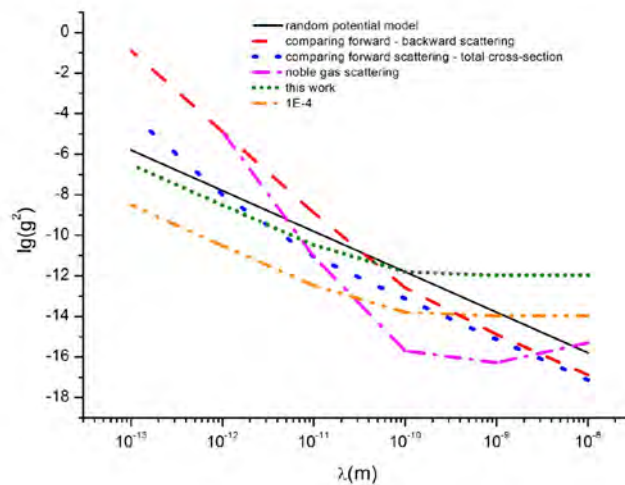
² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

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

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

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



Ограничения на константу связи

1. V.V. Nesvizhevsky, G. Pignol, K.V. Protasov, Phys.Rev. D **77**, 034020 (2008)

2. Y. Kamiya, K. Itagaki, M. Tani, G. N. Kim, and S. Komamiya, Phys. Rev. Lett. **114**, 161101 (2015)



SCIENCE

Сессия 4.
Магнитные структуры и взаимодействия

SCIENCE

SCIENCE

Магнитные фазовые переходы и магнитная структура Tb₃Ni

A. F. Gubkin^{1, 2}, *L. S. Wu*³, *S. E. Nikitin*^{4, 5}, *A. V. Suslov*⁶, *A. Podlesnyak*³,
*O. Prokhnenko*⁷, *K. Prokeš*⁷, *F. Yokaichiya*⁷, *L. Keller*⁸, and *N. V. Baranov*^{1, 2}

¹ M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

² Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

³ Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA

⁴ Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany

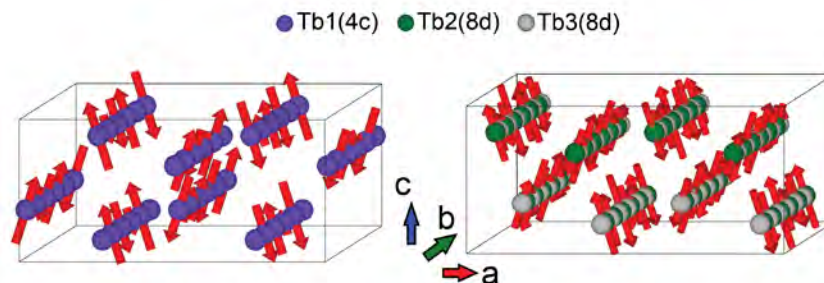
⁵ Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

⁶ National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, Florida, USA

⁷ Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Berlin, Germany

⁸ Paul Scherrer Institut, Villigen PSI, Switzerland

Методами упругого рассеяния нейтронов, а также с помощью измерений намагниченности и магнитосопротивления в магнитных полях до 180 кЭ проведено детальное исследование магнитных состояний, реализующихся в редкоземельном интерметаллиде Tb₃Ni при изменении температуры и под действием магнитного поля. Показано, что при охлаждении ниже температуры Нееля $T_N = 61$ К в этом соединении реализуется сложная несоизмеримая магнитная структура типа «спиновая волна» описываемая магнитной супергруппой $P112_1/a1'(ab0)0ss$ и волновым вектором $k_{IC} = (0.506 \ 0.299 \ 0)$. При дальнейшем охлаждении изменение магнитной структуры проходит в три стадии: (i) появление соизмеримой компоненты $k_1 = (\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0)$ ниже 58К; (ii) частичное подавление несоизмеримой компоненты и реализация смешанного магнитного состояния, описываемого комбинацией волновых векторов k_{IC} , k_1 и $k_2 = (\frac{1}{2} \ \frac{1}{4} \ 0)$ в интервале температур $48 < T < 51$ К; (iii) окончательное подавление несоизмеримой компоненты и появление двух дополнительных соизмеримых компонент с волновыми векторами $k_3 = (\frac{1}{2} \ 1/3 \ 0)$ и $k_4 = (\frac{1}{2} \ 0 \ 0)$ при температурах ниже 48 К. Установлено, что в низкотемпературное магнитное состояние ниже 48 К описывается магнитной ячейкой с параметрами $2a \times 12b \times c$, возникающей в результате взаимодействия двух первичных параметров порядка k_2 и k_3 .



Схематическое изображение магнитной структуры Tb₃Ni при температуре $T=58$ К для кристаллографической ячейки с размерами $2a \times 12b \times c$.

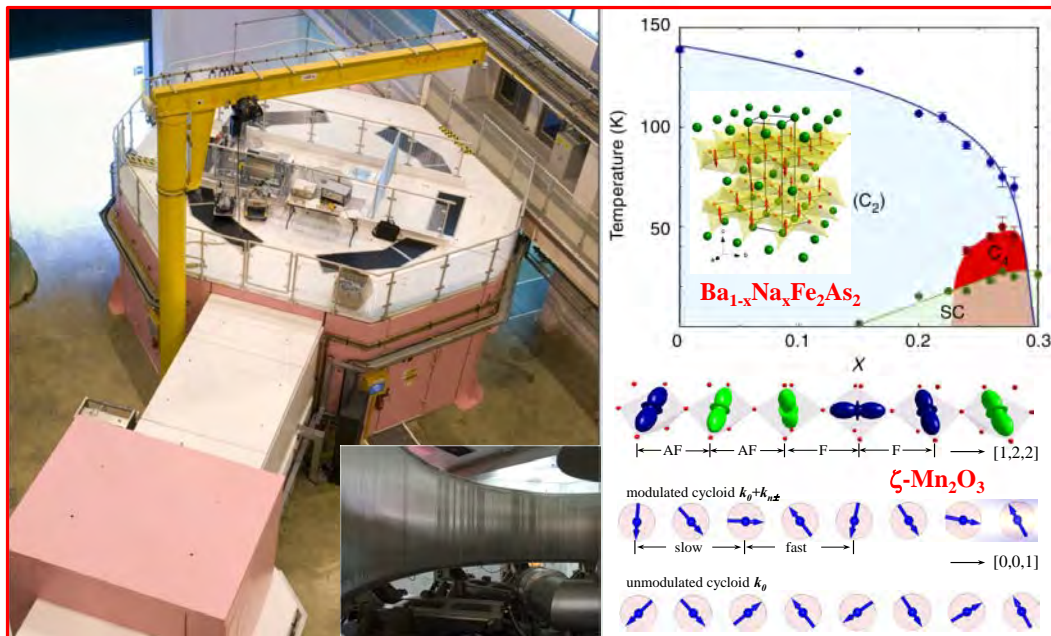
Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №18-72-10022.

Magnetic degrees of freedom in emerging materials

D. D. Khalyavin

ISIS Facility, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, Didcot, Oxon, United Kingdom

One of the key experimental tools, playing a leading role in exploration of magnetic degree of freedom in solids, is neutron diffraction. Large scale facilities spread across the world provide excess to neutron scattering for a vast user community and substantially contribute to fundamental understanding of magnetic phenomena. In the presentation, I will overview some exciting science on the WISH beamline - a cutting edge high-resolution cold-neutron diffractometer located at the second target station of the ISIS facility. The beamline was primarily designed to study magnetic materials and large unit cell systems. For several years of operation, WISH data have made breakthroughs in many classes of emerging materials, such as multiferroics, iron-based superconductors, geometrically frustrated systems, heavy fermion metals and Kondo semiconductors. Based on several representative examples, I will discuss so called “multi- k ” magnetic structures – complex periodic spin arrangements whose Fourier decomposition involves more than one propagation vector. Determination of these type of magnetic structures is challenging from experimental point of view but very often the materials with multi- k magnetic ground state exhibit fascinating and novel physical phenomena. I will discuss magnetic interactions and symmetry aspects of interplay between magnetism and other degrees of freedom in these exciting materials.



WISH- high-resolution cold-neutron magnetic diffractometer

I would like to acknowledge the project TUMOCS. This project has received funding from the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 645660.

Роль взаимодействия Дзялошинского-Мория в формировании скирмионной решетки кубических магнетиков без центра инверсии

*Е. В. Алтынбаев^{1, 2, 3}, К. А. Пшеничный^{1, 2, 3}, А. Heinemann⁴, G. Chaboussant⁵,
N. Martin⁵, А. В. Цвященко³, С. В. Григорьев^{1, 2, 3}*

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

⁴ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

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

С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов было исследовано влияние внешнего магнитного поля на магнитную структуру соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0.0, 0.1, 0.2$ и 0.3 , синтезированных под высоким давлением [1]. Известно, что магнитная система этих соединений в нулевом поле при низких температурах упорядочивается в спиновую спираль с волновым вектором $k = 0.2 \text{ нм}^{-1}$ [2]. В работе определена область существования скирмионной решетки (СкР) на фазовой диаграмме магнитное поле – температура для соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0.1, 0.2$ и 0.3 . При этом СкР не была обнаружена для чистого соединения $MnGe$ в диапазоне температур $50 \text{ К} < T < 200 \text{ К}$ и полей $0 \text{ Т} < H < 10 \text{ Т}$. Установлено, что область существования СкР растет с концентрацией x и оказывается наибольшей для $x = 0.3$, для которого СкР была обнаружена в диапазоне полей $H_{c1} < H < H_{c2}$, и в диапазоне температур, $30 \text{ К} < T < 150 \text{ К}$. При малых значениях x , диапазон полей СкР заметно сужается, тогда как температурная область существования СкР меняется мало.

Мы связываем возникновение и увеличение области существования СкР в этих соединениях с линейным ростом величины взаимодействия Дзялошинского-Мория в соединениях $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с ростом x [5-7]. Также мы полагаем, что ширина температурного диапазона существования СкР на фазовой диаграмме определяется наличием геликоидальных флуктуаций магнитной структуры, которые были обнаружены для этих соединений при температурах много ниже температуры магнитного упорядочения [8]. Наличие геликоидальных флуктуаций обусловлено конкуренцией двух различных взаимодействий, формирующих магнитную структуру соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$. РККИ взаимодействие определяет магнитную структуру соединения $MnGe$. Влияние взаимодействия Дзялошинского-Мория, минимальное для чистого $MnGe$, растет с концентрацией атомов Fe и приводит к полной дестабилизации магнитной структуры при $x_{c1} = 0.25$ [8]. Комбинация двух условий – наличие геликоидальных флуктуаций и существенное влияние взаимодействия Дзялошинского-Мория на магнитную систему - приводит к формированию СкР в соединениях с $x > 0.1$.

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

2. S. V. Grigoriev, et al., Physical Review Letters vol. 110 pp. 207201 (2013)

3. Чубова Н.М., и др., ЖЭТФ vol. 152 N. 5 pp. 933-943 (2017)

4. H. Wilhelm, et al., Phys. Rev. Lett. vol. 107 pp. 127203 (2011)

5. T. Koretsune, et al., Sci. Rep. 5, 13302 (2015).

6. J. Gayles, et al., Phys. Rev. Lett. 115, 036602 (2015).

7. T. Kikuchi, et al., Phys. Rev. Lett. 116, 247201 (2016).

8. E. Altynbaev, et al., Physical Review B vol. 94 N. 17 (2016)

Магнитотранспортные свойства и неоднородное магнитное состояние в соединении Ho_5Pd_2

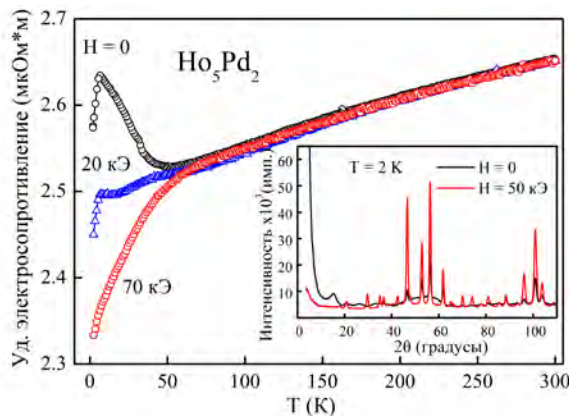
А. А. Ваулин¹, Е. А. Шерстобитова¹, Н. В. Баранов^{1, 2}, А. Хосер³, А. Ф. Губкин^{1, 2}

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

² *Уральский федеральный университет им. первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

³ *Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Berlin, Germany*

Методами упругого рассеяния нейтронов, а также с помощью измерений намагниченности и электросопротивления в магнитных полях до 90 кЭ проведено детальное исследование влияния внешнего магнитного поля на электрические и магнитные свойства соединения Ho_5Pd_2 . Было показано, что в отсутствие внешнего магнитного поля электросопротивление демонстрирует нехарактерное для металлических систем немонотонное поведение. Приложение внешнего магнитного поля 50 кЭ приводит к кардинальному изменению поведения электросопротивления с температурой и восстановлению металлического характера проводимости. Проведенное нами нейтронографическое исследование магнитного состояния соединения Ho_5Pd_2 показало, что приложение внешнего магнитного поля выше ~ 10 кЭ приводит к частичному подавлению ближнего антиферромагнитного порядка, а приложение магнитного поля выше 50 кЭ приводит к установлению дальнего ферромагнитного порядка в образце. Полученные результаты позволяют заключить, что аномальный ход кривой электросопротивления Ho_5Pd_2 в нулевом поле имеет магнитную природу и обусловлен существованием в этом соединении неоднородного магнитного и электронного состояния. В частности, дополнительный вклад в электросопротивление при температурах ниже 50 К может быть вызван существованием энергетической щели в электронном спектре кластеров с АФМ порядком, а также рассеянием электронов на флуктуациях спиновой плотности в пространственно неоднородном магнитном состоянии.



Зависимость удельного электросопротивления Ho_5Pd_2 от температуры в нулевом и внешнем магнитном поле; (вставка) Нейтронограммы порошкового образца Ho_5Pd_2 при $H=0$ и 50 кЭ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №18-72-10022.

Исследования магнитной структуры в замещенных мультиферроиках-ферроборатах $\text{Nd}(\text{Tb})\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$. Нейтронная дифракция на монокристаллах.

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

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

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

³ *Institut Laue Langevin, Grenoble, France*

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

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

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

Мультиферроики-ферробораты характеризуются комбинацией сильной кристаллической анизотропией одноосного характера и одноионной анизотропией редкоземельного иона. Магнитный порядок носит индуцированный характер и обусловлен, прежде всего, порядком в железной подрешетке. В крайнем составе $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ реализуется магнитная структура с моментами, которые лежат в плоскостях, перпендикулярных гексагональной оси с, тогда как в $\text{TbFe}_3(\text{BO}_3)_4$ моменты направлены вдоль оси с. Такое сильное различие в магнитных структурах обусловлено разной одноионной анизотропией и предполагает сложную магнитную структуру в смешанных составах, что является предметом исследований.

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

Магнитный порядок в $\text{Nd}(\text{Tb})\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ оказался сложной неколлинеарной структурой, которую можно рассматривать как искаженную легкоосную структуру, вызванную слабыми асимметричными взаимодействиями. При более высоких температурах магнитная структура трансформируется в коллинеарную скошенную структуру.

Обсуждается связь магнитных структур и измеренной электрической поляризации, как спонтанной, так и в магнитных полях.

Дифракционные исследования 2D магнетизма в сотообразных оксидах

*А. И. Курбаков^{1, 2}, А. Н. Коршунов^{1, 2}, С. Ю. Подчерзев^{1, 3}, А. Л. Малышев¹,
В. Б. Налбандян⁴, А. Ю. Никулин⁴, М. А. Евстигнеева⁴, Е. А. Зверева⁵,
А. Н. Васильев⁵, F. Damay⁶, A. Senyshyn⁷, M. Avdeev⁸*

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 *Institut Laue Langevin, Grenoble, France*

⁴ *Южный федеральный университет, Ростов на Дону, Россия*

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

⁶ *Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette, France*

⁷ *Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Technische Universität München, Garching, Germany*

⁸ *Bragg Institute, Australian Nuclear Science and Technology Org., Lucas Heights, Australia*

Представлены нейтронные и синхротронные дифракционные исследования сотовых сверхструктур магнитных ионов в слоистых $A_3M_2VO_6$ и $A_2M_2VO_6$ соединениях, где А – щелочной металл, М – переходный металл (*d*-элементы), В – неметаллы Sb, Te (*p*-элементы), О – кислород (*p*-элемент). Анализируется влияние тонких деталей кристаллической структуры на типы магнитных упорядочений и виды магнитных взаимодействий.

Показаны общие особенности спинового упорядочения и проанализированы причины, приводящие к различиям между ними в родственных соединениях. Установлено, что магнитная структура слоистых магнетиков с решеткой типа пчелиные соты чрезвычайно чувствительна к соотношению обменных взаимодействий между ближайшими соседями и следующими, вторыми и третьими соседями, что индуцирует фрустрации и реализацию неклассических магнитных фаз. Экспериментально обнаружено нетривиальное основное квантовое состояние – антиферромагнитное, типа ферромагнитного зигзага.

Продемонстрировано, что зигзагообразный тип спинового упорядочения может быть различен, и зависит, кроме всего прочего, от характера укладки слоев и расстояний между слоями, определяющих довольно небольшие, но иногда значимые межслоевые взаимодействия.

Анализируется возможность подавления зигзагообразного магнитного порядка магнитным полем, что может приводить к формированию квантовой спиновой жидкости Китаева (сильно фрустрированного состояния).

Экспериментальные результаты сравниваются с теоретическим анализом всех обменных путей, включающих t_{2g} и e_g орбитальные взаимодействия в 90° геометрии связей, характерной для данных сотовых соединений.

Все дифракционные результаты хорошо коррелируют с измерениями температурных зависимостей магнитной восприимчивости, теплоемкости и ЭПР, которые также будут представлены, и позволяют их разумно трактовать.

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

Перпендикулярная внешнему магнитному полю компонента намагниченности в трёхмерном нанoаналоге спинового льда: микромагнитное моделирование и эксперимент

*А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Дубицкий², D. Menzel³, Н. А. Саполетова⁴,
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

³ Institut für Physik der Kondensierten Materie, Braunschweig, Deutschland

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

Инвертированные ОпалоПодобные Структуры (ИОПС), получаемые заполнением пустот искусственного опала ферромагнитным материалом, представляют интерес с точки зрения развития концепции Искусственного Спинового Льда (ИСЛ) [1, 2]. Отличительной чертой ИОПС является трёхмерность, обуславливающая бóльшую, по сравнению с обычными ИСЛ, изотропность распределения локальной намагниченности, но усложняющая их экспериментальное изучение.

В работе [3] для описания распределения намагниченности в ИОПС был предложен феноменологический подход, основанный на «правиле льда», регулирующим конфигурации магнитных моментов в системе. Было показано, что при приложении внешнего магнитного поля вдоль кристаллографического направления типа $\langle 121 \rangle$ должна возникать компонента намагниченности, перпендикулярная направлению поля. Для проверки этого факта было проведено микромагнитное моделирование элементарной ячейки ИОПС, и получено распределение намагниченности на различных этапах процесса намагничивания в диапазоне полей от -2 до 2 Тл [4]. Магнитометрия с использованием сверхпроводящего квантового интерферометра (СКВИД) при приложении внешнего магнитного поля вдоль направления $[1-21]$ величиной от -5 до 5 Тл продемонстрировала наличие помимо компоненты намагниченности вдоль поля также и перпендикулярную полю составляющую.

Результаты измерения намагниченности хорошо согласуются с результатами численного эксперимента и подтверждают характер поведения перпендикулярной компоненты намагниченности с изменением магнитного поля, предсказанный феноменологически, то есть с использованием концепции ИСЛ применительно к ИОПС.

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

1. Wang et al., Nature 439 (2006).

2. Schumann et al., APL 97 (2010).

3. Mistonov et al., PRB 87 (2013).

4. Dubitskiy et al., JMMM, 441 (2017).

Магнитные свойства интерметаллидов YCo_5 и YCo_4Si при высоких давлениях

*A. B. Руткаускас¹, Д. П. Козленко¹, Н. О. Голосова¹, С. Е. Кичанов¹, Е. В. Лукин¹,
Б. Н. Савенко¹, Э. Бурзо^{2, 3}, П. Влайч⁴*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

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

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

Интерметаллиды $\text{YCo}_{5-x}\text{M}_x$ (где $\text{M} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$) широко изучаются как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. В этих соединениях встречаются такие явления, как высокая магнитная анизотропия, гигантское магнитосопротивление, магнитокалорический эффект, а также коллапс магнитоупругой решетки. Что делает эти соединения перспективными материалами для магнитных холодильников, постоянных магнитов и т. д.

Соединения RCO_5 и $\text{YCo}_{5-x}\text{M}_x$ кристаллизуются в структуру типа CaCu_5 с пространственной группой $R\bar{6}/mmm$, где атомы Co находятся в позициях $2c$ и $3g$. Также они имеют ферромагнитное упорядочение. Также известно, что эти интерметаллиды чувствительны к изменениям межатомных расстояний, что может привести к значительным изменениям их магнитных свойств.

Структурные исследования при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла, межатомных расстояний и углов с изменениями магнитной структуры, и макроскопических физических свойств, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в интерметаллидах кобальта.

В нашей работе представлены результаты исследования соединений: YCo_5 и YCo_4Si методом нейтронной дифракции при высоких давлениях. Эксперименты проводились на дифрактометрах ДН-6 и ДН-12 на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 (ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна) с использованием камер высокого давления с сапфировыми наковальнями.

Соединение YCo_5 было исследовано при комнатной температуре при давлениях $P \leq 7.2$ ГПа. Был обнаружен объемный коллапс решетки, что связано с изменением спиновых состояний кобальта из высоко-спинового в низко-спиновое.

Соединение YCo_4Si было исследовано в диапазоне давлений $0 \leq P \leq 5.3$ ГПа и в температурном $10 \leq T \leq 320$ К, соответственно. Под давлением обнаружено смещение температуры Кюри с одинаковым барическим коэффициентом для кобальтов в позициях $2c$ и $3g$ в область более низких температур.

Работа поддержана грантом РФФИ № 17-02-00112.

Температурная зависимость волнового вектора $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$

*М. А. Сёмкин^{1,2}, Н. В. Урусова¹, Д. С. Неов³, А. И. Бескровный³, Д. Г. Келлерман⁴,
А. Н. Пирогов^{1, 2}*

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

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

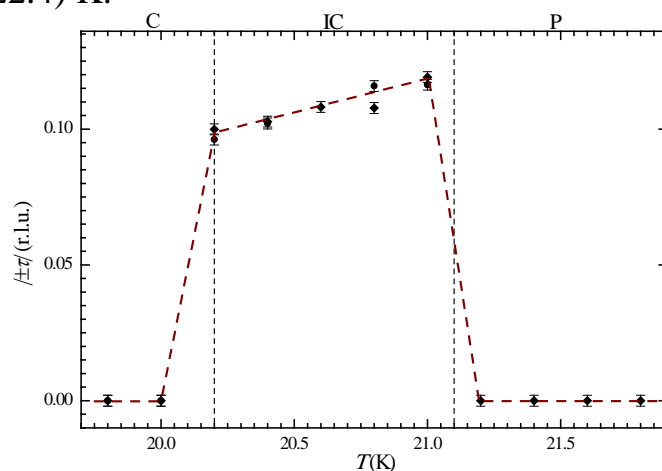
³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *Институт химии твёрдого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В нашей работе исследуется влияние 10 % замещения ионов никеля кобальтом на температурную зависимость волнового вектора несоизмеримой антиферромагнитной (АФ) структуры соединения LiNiPO_4 . Предварительно, из температурных зависимостей теплоемкости определены критические температуры: температура перехода из соизмеримой АФ фазы в несоизмеримую АФ структуру (T_{IC-C}) и температура Нееля (T_N). Установлено, что 10 % замещение кобальтом понижает температуру с $T_{IC-C} = 20.8(1)$ К до $T_{IC-C} = 20.2(1)$ К и температуру Нееля с $T_N = 21.7(1)$ К до $T_N = 21.1(1)$ К.

С целью уточнить параметры несоизмеримой АФ структуры соединения $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$ мы провели нейтронографические измерения в интервале температур (10–295) К. Измерения выполнены на установке ДН-2, смонтированной на реакторе ИБР-2 (г. Дубна). Образец представлял собой монокристалл, размером (1x1x2) мм³, выращенный флюсовым методом.

Экспериментальные нейтронограммы $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$ получены при сканировании в направлении $[0\ k\ 0]$. Магнитные сателлиты $(0\ 1\pm\tau\ 0)$, соответствующие несоизмеримой АФ структуре по типу поперечной спиновой волны, обнаружены на нейтронограммах при температурах от 20.2 К до 21.0 К. На рис. показана температурная зависимость волнового вектора $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$. В области несоизмеримой структуры наблюдается линейный рост величины волнового вектора $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$ с 0.097 до 0.112 ед. обр. реш. Волновой вектор LiNiPO_4 изменяется от 0.080 до 0.130 ед. обр. реш. в интервале температур (20.7–22.4) К.



Температурная зависимость волнового вектора $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{PO}_4$

Работа частично поддержана программой «Поток» № АААА-А18-118020190112-8 и Государственным контрактом № 3.6121.2017/8.9 между УрФУ и Минобрнауки РФ.

Кристаллическая и спиновая структура фрустрированного магнетика $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$

А. Е. Сулопарова, А. Н. Коршунов, А. И. Курбаков, М. Д. Кучугура

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

Ортогерманаты и ортосиликаты переходных и щелочных металлов интересны высоким потенциалом для использования в электрохимических устройствах. Электрохимические свойства исследуемого соединения $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ хорошо изучены, в отличие от его физических свойств.

По данным синхротронной порошковой дифракции, полученной на линии BM25, ESRF структура $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$ представляет собой ромбическую структуру ($\text{Pmn}2_1$) с параметрами кристаллической ячейки $a = 6.4765$, $b = 5.4856$, $c = 5.0601$ (Å) (рис.1)

Для определения спиновой структуры в упорядоченном состоянии и её температурной эволюции были проведены нейтронные исследования на порошковом дифрактометре DMC, PSI, Швейцария. Магнитная подсистема ионов марганца базируется на треугольной геометрии. Такая решётка в присутствии антиферромагнитных взаимодействий фрустрирована, так как существует конфликт во взаимодействиях между ближайшими соседями.

Нейтронные данные по температуре демонстрируют, что ниже 8 К появляется магнитное упорядочение ионов Mn с вектором распространения $k = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Важно, что такое дальнедействующее магнитное упорядочение сосуществует с короткодействующим, возникающим выше температуры Нееля в районе 30 К.

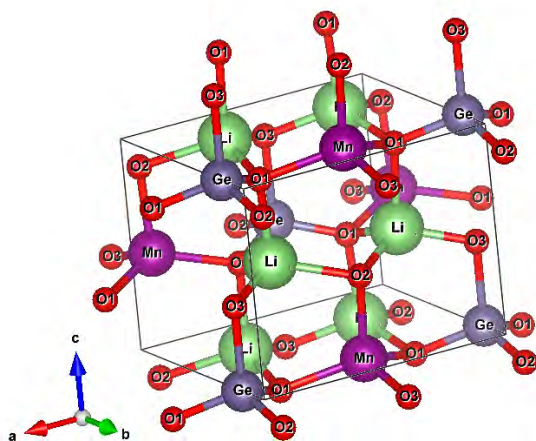


Рис.1 Кристаллическая структура $\text{Li}_2\text{MnGeO}_4$

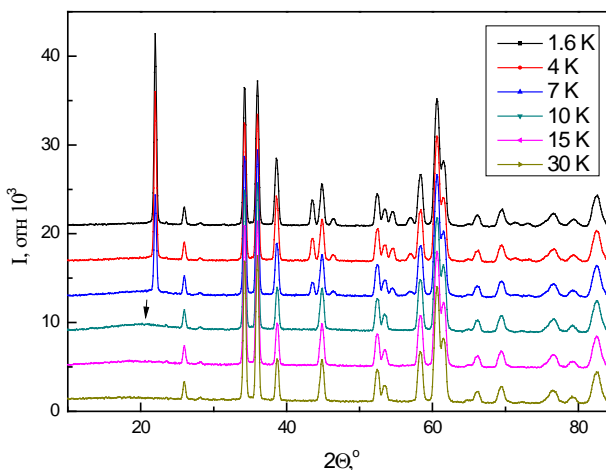


Рис. 2. Зависимость нейтронных данных от температуры. Стрелочкой отмечена область магнитного диффузного рассеяния.

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



SCIENCE

***Сессия 5.
Биологические системы***

SCIENCE

SCIENCE

Completeness of SAS data analysis: investigations of large protein complexes by SAXS/SANS EID and SEC-SAXS methods

*A. V. Vlasov^{1, 2}, D. V. Zabelskii^{1, 3}, Yu. L. Ryzhykau¹, T. N. Murugova^{1, 4},
D. V. Soloviov^{1, 4, 6}, O. I. Ivankov^{1, 4, 7}, A. V. Rogachev^{1, 4}, G. Büldt¹,
V. I. Gordeliy^{1, 2, 10} and A. I. Kuklin^{1, 4}*

¹ *Research center for molecular mechanisms of aging and age-related diseases, Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia*

² *Institute of Crystallography, RWTH Aachen University, Aachen, Germany*

³ *Institut de Biologie Structurale, J.-P. Ebel, Université Grenoble Alpes-CEA-CNRS, Grenoble, France*

⁴ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

⁵ *European Molecular Biology Laboratory, Grenoble Outstation, Grenoble, France*

⁶ *Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine*

⁷ *Institute for safety problems of nuclear power plants NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

⁸ *European X-Ray Free-Electron Laser Facility GmbH at Amtsgericht Hamburg, Hamburg, Germany*

⁹ *CSI Organic Chemistry and Biochemistry, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, Germany*

¹⁰ *Institute of Complex Systems: Structural Biochemistry (ICS-6), Research Centre Jülich, Jülich, Germany*

The method of small angle scattering (SAS) is widely used in the field of biophysical research of proteins in aqueous solutions. Obtaining low-resolution structure of proteins is still a highly valuable method despite the advances in high-resolution methods such as X-ray diffraction, cryo-EM etc. SAS offers the unique possibility to obtain structural information under conditions close to those of functional assays, i.e. in solution, without different additives, in the mg/mL concentration range. SAS method has a long history, but there are still many uncertainties related to data treatment. We compared 1D SAS profiles of large protein complex ($d = 120\text{\AA}$) apoferritin that consists of twenty four subunits, obtained by X-ray diffraction (XRD) and SAS methods. It is shown that SAS curves for X-ray diffraction crystallographic structure of apoferritin differ more significantly than it might be expected due to the resolution of the SAS instrument. Extrapolation to infinite dilution (EID) method does not sufficiently exclude dimerization and oligomerization effects and therefore could not guarantee total absence of dimers account in the final SAS curve. In this study, we show that EID SAXS, EID SANS and SEC-SAXS methods give complementary results and when they are used all together, it allows obtaining the most accurate results and high confidence from SAS data analysis of proteins. It also might be useful for accurate structure determination of other large protein complexes.

The reported study was funded by RFBR according to the research project № 18-34-00256.

Water dynamics in the nano-gel-film of *Gluconacetobacter xylinus* cellulose

R. Yu. Smyslov^{1, 2}, G. P. Kopitsa^{1, 3}, A. A. Kulminskaya¹, E. V. Zhurishkina¹,
M. Zamponi⁴, A. K. Khripunov², Yu. Gorshkova⁵

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

² Institute of Macromolecular Compounds RAS, Saint Petersburg, Russia

³ Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry RAS, St. Petersburg, Russia

⁴ Forschungszentrum Juelich GmbH, JCNS at MLZ, Garching, Germany

⁵ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

High interest in new materials for optics and medicine dictates the necessity to seek for new composites based on carbohydrates and their complexes with metal ions. One of the most promising polymers in this area is cellulose, which is an abundant polymer in the Earth. Study of cellulose, extracellularly produced by *Gluconacetobacter xylinus* as nano-gel-film (NGF), is of particular importance due to potentiality to prepare organo-inorganic composites based on bacterial cellulose. An excellent example of cellulose composites with silver and selenium nanoparticles stabilized by polyvinylpyrrolidone can be used in medical practice as wound covers [1]. Cellulose, being the polymer with a set of functional hydroxyl groups, has complexed supramolecular structure and contains the pores responsible for its sorption properties. Microfibrils of *G. xylinus* cellulose (GxC) were found to have cross-sectional dimensions of 7×13 nanometers and aggregate in lamella-like ribbons with the width of 70 – 145 nm [2]. The latter ones form hydrogen bond network between their hydroxylic groups of anhydroglucose units and water molecules. In the NGF, the water areas (lacunas) can differ in volume [3]. Due to the different mobility of water molecules forming the solvation shells or being in the small volume lacunas, their freezing temperature can vary. For the time being, revealing the role of the dynamics of confined water in the interaction of supramolecular structure and metal ions in the mesoscopic range is a fundamental problem [4].

This work has been aimed to study water dynamics under the formation of the NGF supramolecular structure. The idea was to study interactions of water molecules with the NGF supramolecular arrangement at the mesoscopic level. We attempted to show the nanosecond dynamics of GxC, *i. e.*, cellulose relaxation processes, by substituting H₂O by D₂O in NGF, and OH- by OD-groups in GxC during cellulose biosynthesis.

We studied inelastic neutron scattering of GxC nano-gel-films at the dried-material / water ratio equal to 0.7/0.3 using SPHERES neutron backscattering spectrometer (FRM II, MLZ, JCNS, Garching, Germany) in the dynamic range $\pm 30 \mu\text{eV}$. Some first experiments have been performed to estimate nanosecond dynamics of cellulose rearrangement and presence of different type of confined water.

1. V. V. Volkov, *et al.*, *Crystallography reports* 169, 54 (2009). DOI: 10.1134/S1063774509020011.

2. H.P. Fink, H.J. Purz, A. Bohn, J. Kunze, *Macromol. Symp.* 207,120 (1997).

3. T.A. Babushkina, *et al.*, *Crystallography Reports* 312, 55 (2010).

4. H. O'Neill, *et al.*, *Scientific Reports* 7: 11840 (2017). DOI:10.1038/s41598-017-12035-w

Структурные исследования взаимодействия амилоидогенного пептида-фрагмента субъединицы PB1 полимеразы вируса гриппа с моделями биологических мембран

*А. Б. Бондаренко¹, Я. А. Забродская^{1, 2}, Ю. Е. Горшкова³,
Д. В. Лебедев¹, В. В. Егоров^{1, 2}*

¹ Научно-исследовательский институт гриппа им. А. А. Смородинцева, Санкт-Петербург, Россия

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

³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В связи с постоянной антигенной изменчивостью вируса гриппа и появлением устойчивости штаммов к существующим препаратам, поиск новых мишеней и разработка воздействующих на эти мишени агентов является актуальной задачей. Одной из таких перспективных мишеней для создания новых противовирусных препаратов является полимеразный комплекс вируса гриппа. Известно, что участок с 1-й по 25-ю а.о. субъединицы PB1 полимеразного комплекса вируса гриппа PB1 (1-25) играет ключевую роль во взаимодействии с субъединицей PA [1]. Такое взаимодействие происходит только в том случае, когда N-концевой домен PB1 находится в альфа-спиральной конформации [2, 3].

В небольших концентрациях пептид PB1 (6-13) взаимодействует с N-концевым участком субъединицы PB1 полимеразы вируса гриппа в пептидной модели [4] с образованием амилоидоподобных структур. Также данный пептид обладает противовирусной активностью, показанной в экспериментах на клеточных культурах [5].

Ранее нами были получены структурные и временные параметры взаимодействия пептида PB1 (6-13) с полимеразой вируса гриппа [4] а также временные характеристики проникновения данного пептида внутрь клеток. Посредством конфокальной микроскопии и проточной цитофлуориметрии мы показали, что растворимый пептид способен проникать в клетки MDCK [5] и A549 в присутствии 1% раствора DMSO (диметилсульфоксида) [6]. Одним из возможных механизмов проникновения данного пептида через мембрану клетки является образование поры во время слияния мембран эндосом при фагоцитозе, другим возможным механизмом проникновения пептида PB1 (6-13) через клеточные мембраны является проникновение по CPP (cell penetrating peptide)-механизму из-за преобладания в его последовательности положительно заряженных аминокислот.

В данной работе мы изучили особенности взаимодействия пептида PB1 (6-13) в различных концентрациях DMSO с модельной липидной мембраной, а также исследовали структурные особенности проникновения пептида PB1 (6-13) через мембраны липосом, применив метод малоуглового нейтронного рассеяния на спектрометре ЮМО в диапазоне q 0,1-5 нм⁻¹.

В ходе экспериментов были получены данные: о структуре агрегатов РВ1 (6-13) в докритической и критической концентрации в присутствии и отсутствии DMSO-D6; определена концентрация DMSO-D6, при которой происходит проникновение пептида через модельные мембраны (фосфатидилхолин/фосфатидилэтаноламин (80/20)); выяснено влияние пептида РВ1 (6-13) в физиологическом буферном растворе и пептида РВ1 (6-13) в растворах DMSO на мембранные структуры из фосфатидилхолина/фосфатидилэтаноламина (80/20).

Настоящее исследование механизмов трансмембранного транспорта на основе малоуглового нейтронного рассеяния также имеет методическую ценность для изучения проникновения в клетку различных препаратов на основе пептидов.

1. K. Wunderlich, D. Mayer et al., PLoS One, 4(10), e7517 (2009).
2. X. He, J. Zhou et al., Nature, 454(7208), 1123–6 (2008).
3. S. Chang, D. Sun et al., Mol. Cell, 57(5), 925–35 (2015).
4. V. V. Egorov, O. V. Matusевич et al., Int. J. Pept., 2013, 370832 (2013).
5. O. V. Matusевич, V. V. Egorov et al., Antiviral Res., 113, 4–10 (2015).
6. J. Ali and J. N. Shelton, J. Reprod. Fertil., 99, 471 (1993).

Структурные исследования CBS-пирофосфатазы методом малоуглового рентгеновского синхротронного рассеяния для выявления способов ингибирования активности этого фермента

Л. А. Дадинова¹, В. А. Анашкин², Э. В. Штыкова^{1, 3}

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² НИИ физико-химической биологии им. А. Н. Белозерского, МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия

Несмотря на успехи в изучении структур и механизмов действия неорганических пирофосфатаз (PPase), вопрос о структурных особенностях семейства II PPase с регуляторной вставкой, содержащей пару доменов CBS (название в честь цистатиона β -синтазы, где они были впервые обнаружены) остается открытым по сей день. Известно, что небольшое изменение, вызванное эффектором в регуляторной части, приводит к более существенному изменению функциональной области. Однако установление основных регулирующих механизмов взаимодействия между доменами представляет большую проблему, поскольку данные о структуре полноразмерного фермента отсутствуют [1]. Согласно литературным данным, CBS-PPase является гомодимерным белком [2]. В настоящей работе структура бактериальной CBS-PPase была исследована методом малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS) в сочетании с он-лайн эксклюзионной хроматографией (SEC-SAXS) с использованием синхротронного излучения на линии P12 накопительного кольца PETRA III (DESY, Гамбург). Нами было обнаружено, что в растворе белок существует как равновесная смесь олигомеров. Метод SEC-SAXS позволил подробно проанализировать эту смесь и ее отдельные фракции. В результате было выявлено, что наименьшая олигомерная единица белка в растворе - тетрамер, структура которого была нами определена с помощью экспериментальных данных SAXS, молекулярного докинга и известных кристаллических структур регуляторных и каталитических доменов CBS-пирофосфатазы. Анализ олигомеров более высокого порядка показал, что в растворе белок образует упорядоченные ассоциаты спиральной формы.

Полученная в ходе исследования информация о структуре CBS-PPase позволит определить пути передачи информации между доменами белка, а также поможет ответить на ряд вопросов, связанных с особенностями регуляции активности ферментов через CBS домены.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-34-00918.

1. A. Salminen, V. A. Anashkin, et al., JBC. 289, 22865 (2014).

2. H. Tuominen, A. Salminen et al., J. Mol. Biol., 398, 400 (2010).

Нейтроны и фармакология

М. А. Киселев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Фосфолипиды являются главной компонентной липидной мембраны клетки - основы биологической мембраны. Церамиды являются главной компонентой липидной матрицы верхнего ороговевшего слоя кожи млекопитающих. По своей структуре и свойствам липидная мембрана является классическим нанообъектом с характерным размером в области 5 нм.

Современные бионанотехнологии используют фосфолипиды и церамиды как основную компоненту лекарств и косметических средств. Наночастицы на основе фосфолипидов используются как переносчики лекарств. Развитие фармацевтических технологий в России требует применения методов рассеяния нейтронов и синхротронного излучения для определения структуры и свойств липидного бислоя.

В докладе представлены результаты работ по исследованию:

- Методом дифракции нейтронов структуры многослойной липидной мембраны, моделирующей структуру липидной матрицы верхнего ороговевшего слоя кожи. Исследования выполнялись совместно с Фармацевтическим факультетом Университета Мартина Лютера, Халле, Германия. Главным результатом этого направления является доказательство преимущества липофильного направления диффузии лекарств через кожу по сравнению с гидрофильным путем.
- Методом малоуглового рассеяния нейтронов структуры нанолекарств на основе соевых фосфолипидов. Исследования выполнялись совместно с разработчиком этих лекарств - Институтом Биомедицинской Химии им. В.Н. Ореховича. Важным результатом этого направления является доказательство формирования структуры нанолекарств на основе фосфолипидов как критически малых везикул.

Одновременно демонстрируется эффективность взаимодополняющего применения нейтронного и синхротронного излучения в наших исследованиях.

Работа финансируется грантом РФФИ 14-12-00516.

1. M. A. Kiselev, D. Lombardo. Structural characterization in mixed lipid membrane systems by neutron and X-ray scattering. *BBA* 1861 (2017) 3700-3717.
2. A.Yu. Gruzinov, A.V. Zabelin, M.A. Kiselev. Short periodicity phase based on ceramide [AP] in the model lipid membranes of stratum corneum does not change during hydration. *Chemistry and Physics of Lipids* 202 (2017) 1-5.

Использование методов нейтронного рассеяния в исследовании структурной организации генетического материала эукариот

Д. В. Лебедев¹, В. В. Егоров^{1, 2, 3}, М.В.Филатов¹, В. В. Исаев-Иванов¹

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

² Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург, Россия

³ Научно-исследовательский институт гриппа им. А. А. Смородинцева, Санкт-Петербург, Россия

Одной из фундаментальных проблем клеточной биологии является загадка злокачественной трансформации клеток и возникновения онкологических заболеваний. На протяжении многих десятилетий в этой области доминировал генетический подход, направленный на выявление мутационных нарушений в специфическом наборе онкогенов или антионкогенов, как основной, если не единственной, причины этого явления. Сегодня становится ясным, что канцерогенез - это комплексный многошаговый процесс, направляемый как генетическими мутациями, так и эпигенетическими изменениями, затрагивающими важнейшие клеточные процессы, в том числе и принципы организации структуры хроматина клетки.

Нейтронное рассеяние является едва ли не единственным инструментом для получения структурной информации о функциональных состояниях биологических макромолекулярных комплексов в нативных условиях водного раствора. При этом применение нейтронов, в отличие от рентгеновского излучения, практически исключает влияние радиационных повреждений на крупномасштабную структуру биологических макромолекул. Нейтронные методы позволяют изучать характеризовать сложные иерархические системы, в том числе в живую ткань *ex-vivo*, на масштабах от единиц до сотен нанометров. Важным преимуществом малоуглового нейтронного рассеяния является простота использования метода вариации контраста, позволяющего разделить вклад в рассеяние компонентов системы с различной плотностью рассеяния, таких как белки, липиды, нуклеиновые кислоты.

В докладе представлены результаты применения методов малоуглового и ультрамалоуглового нейтронного рассеяния в исследовании упаковки генетического материала клеток эукариот в нормально пролиферирующих и злокачественных клетках, а также воздействия различных физико-химических и биологических агентов на структуру хроматина.

**Трехмерное моделирование структуры макромолекул по данным
рассеяния растворами**

М. В. Петухов^{1, 2, 3, 4}, *D. Franke*³, *П. В. Конарев*^{1, 5}, *A. Panjkovich*⁴, *A. Tuukkanen*⁴,
*H. D. T. Mertens*⁴, *A. Г. Кухней*⁴, *N. R. Hajizadeh*⁴, *C. M. Jeffries*⁴, *Д. И. Свергун*⁴

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия

⁴ European Molecular Biology Laboratory, Hamburg, Germany

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

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) – структурный метод низкого (1-2 нм) разрешения, позволяющий изучать разупорядоченные и слабоупорядоченные объекты в широком диапазоне размеров и молекулярных масс. Метод активно используется для изучения строения биологических макромолекул в растворе, т.е. в условиях близких к физиологическим [1]. В последние десятилетия метод активно развивался благодаря появлению новых методов компьютерного моделирования для анализа данных МУРР [2, 3]. При отсутствии априорной информации о структуре изучаемых макромолекул, МУРР позволяет определить максимальный размер частицы, ее радиус инерции, исключенный объем, а также молекулярный вес. Метод дает возможность *ab initio* определения формы частиц растворенного вещества. При наличии структур высокого разрешения, полученных другими методами, малоугловое рассеяние позволяет осуществлять их скрининг с целью определения конформации и олигомерного состояния в растворе. В случае гибких макромолекул, таких как многодоменные или несвернутые белки, производится поиск оптимального ансамбля множественных конформаций. Для изучения структуры комплексов применяется метод молекулярной тектоники, суть которого заключается в поиске пространственной конфигурации субъединиц с заданной атомной структурой, которая наилучшим образом согласуется с данными МУРР. Данные методы реализованы в комплексном программном пакете ATSAS, чьи программы будут представлены вместе с практическими примерами их применения.

Работа была поддержана грантами РФФИ КОМФИ 17-00-00487 и ЕМБЛ_m 18-54-74001.

1. Svergun DI, Koch MH, Timmins PA, May RP (2013) Small Angle X-ray and Neutron Scattering from Solutions of Biological Macromolecules. Oxford University Press, London

2. Franke D, Petoukhov M V., Konarev P V., Panjkovich A, Tuukkanen A, Mertens HDT, Kikhney AG, Hajizadeh NR, Franklin JM, Jeffries CM, Svergun DI (2017) ATSAS 2.8: a comprehensive data analysis suite for small-angle scattering from macromolecular solutions. J. Appl. Crystallogr. 50: 1151–1158

3. Petoukhov, M.V. & Tuukkanen, A. (2017). SAS-based structural modeling and model validation. In Biological Small Angle Scattering: Techniques, Strategies and Tips (Chaudhuri, B., Muñoz, I.G., Qian, S., Urban, V.S. Eds.). Chapter 6, pp. 87-105. Springer

Структурная кинетика комплексов 70S рибосом по данным TR-SAXS

*Т. А. Черемных¹, А. В. Швецов¹, R. Dattani², 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 *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Бактериальная рибосома является мишенью действия примерно половины современных антибиотиков — ингибиторов синтеза белка [1]. Бактерии очень быстро вырабатывают к ним устойчивость. Детализация механизмов биосинтеза делает возможной разработку новых антимикробных препаратов, активных на определённых стадиях функционирования рибосомы. Для этого также необходимо знание структурных особенностей белоксинтезирующих систем.

В экспериментах по времяразрешённому малоугловому рентгеновскому рассеянию (TR-SAXS) на рибонуклеопротеидных комплексах исследовался процесс транслокации — перемещения тРНК между сайтами связывания на рибосоме. Наблюдались также реакции ассоциации и диссоциации субъединиц бактериальных рибосом. Комплексы рибосомных частиц были исследованы в остановленном потоке с различными лигандами. Процесс транслокации инициализировался добавлением к претранслокационному комплексу (PRE) фермента транслоказы с последующей регистрацией серии спектров рассеяния. Обратная транслокация была инициализирована путём добавления в посттранслокационный комплекс (POST) деацелированных тРНК.

Анализ полученных данных указывает на то, что в оптимальных условиях структурные изменения в рибосомных частицах в процессе прямой транслокации проходят в первые 30-50 мс после инициации процесса, а реакция обратной транслокации в заданных условиях не сопровождается конформационным переходом, соответствующим ожидаемому по данным статических измерений. При этом транслокация, блокируемая антибиотиком виомицином, останавливается в конформационном состоянии с крупномасштабной структурой, характерной для PRE комплекса.

Несмотря на то, что временное разрешение эксперимента не позволило наблюдать основного структурного перехода между PRE и POST комплексами, применение метода сингулярного разложения (SVD) к данным TR-SAXS позволило зарегистрировать небольшие структурные изменения, которые могут характеризовать более медленные процессы реорганизации компонентов рибосомных комплексов в процессе транслокации, и определить их кинетические параметры.

1. Wilson Daniel N. Ribosome-targeting antibiotics and mechanisms of bacterial resistance // Nature Reviews Microbiology. — 2014. — Vol. 12, no. 1. — P. 35

Новый метод расчёта спектров МУРН с учётом контрастирования H₂O/D₂O по полнотатомными траекториям молекулярной динамики

А. В. Швецов, Д. В. Лебедев, В. В. Исаев-Иванов

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

МУРН является распространенным методом, который может быть использован для изучения различных типов биологических систем в растворе. В случае больших молекулярных комплексов, используя только методы МУРН, можно получить ограниченную информацию о структуре таких систем (например, глобальные геометрические параметры системы). При этом используются гибридные методы такие, как молекулярная динамика с вовлечением данных МУРН. Можно использовать даже ограниченную информацию, полученную методом МУРН, для построения полноатомных моделей биологических систем. Другим фактором является использование данных МУРН для верификации полученных с помощью молекулярной динамики моделей биологических систем. Принимая во внимание два метода, мы можем создавать и проверять атомно-атомные модели даже для большой и сложной молекулярной системы.

Метод расчета кривых SANS [1] и NSE [2] из траекторий MD был разработан и реализован как модули для программного пакета молекулярной динамики GROMACS. Ранее другие группы предлагали методы оценки контраста для небольших систем, таких как жирные кислоты в органических неполярных растворах [3]. Мы создали универсальный метод, позволяющий производить оценку контраста D₂O/H₂O непосредственно из траекторий молекулярной динамики. Эта новая методика была применена к системам, содержащим ДНК и белковые части.

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)

Использование данных МУРН в экспериментах по направленной эволюции на примере глюкоамилазы гриба *A. Awamori*

*А. Е. Шмидт*¹, *А. В. Швецов*¹, *В. Р. Сергеев*^{1, 4}, *А. И. Куклин*^{2, 3}, *А. Радулеску*⁵,
*Г. Мангипия*⁵, *Д. В. Лебедев*¹, *М. А. Суржик*¹, *В. В. Исаев-Иванов*¹

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Московский физико-технический институт (государственный университет), Научно-образовательный центр «Бионанофизика», Долгопрудный, Россия

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

⁵ Центр нейтронных исследований FRM II, Гархинг, Германия

Глюкоамилаза - гликопротеин, принадлежащий к семейству гликозид-гидролаз GH15, катализирующий реакцию гидролиза α -1,4- и α -1,6-гликозидных связей в полимерах и олигомерах глюкозы. Глюкоамилазы из грибов *Rhizopus oryzae*, *Hypocrea jecorina* и подсемейства *Aspergillus* содержат каталитический и крахмал-связывающий домены, связанные O-гликозилированной полипептидной цепью. Известна кристаллическая структура каталитического домена глюкоамилазы гриба *Asp. awamori* [1]. Структура крахмал-связывающего домена глюкоамилазы была определена с помощью ЯМР [2]. Полная структура фермента не известна, но о пространственном положении доменов можно судить по модели, полученной с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния [3].

Глюкоамилаза в составе различных ферментативных смесей широко используется в пищевой, текстильной, фармацевтической и химической промышленности. В отличие от альфа-амилаз, глюкоамилазы очень редко встречаются в гипертермофильных бактериях и архебактериях. Несмотря на их высокую термостабильность, в промышленном производстве они не применяются из-за их сравнительно низкой активности. Вместо этого используются глюкоамилаза гриба *Aspergillus awamori*, имеющая высокую активность при температурах 37-60°C. Однако такой нетермостабильный фермент не удовлетворяет жестким требованиям (80-100°C) современных промышленных биореакторов. В связи с этим было необходимо получить более термостабильные формы глюкоамилазы методами направленной эволюции с использованием данных измерений МУРН.

Для рекомбинантной глюкоамилазы были измерены спектры МУРР и МУРН с вариацией контраста. Полученные данные указывали, что глюкоамилаза в растворе находится в мономерной форме и содержит гликозидную компоненту, которая вносит значительный вклад в рассеяние. Результаты экспериментов использовались при построении полноатомной модели белка с учетом N- и O-гликозилирования методами молекулярного моделирования. Используя данные о трехмерной структуре фермента, было проведено моделирование термоинактивации глюкоамилазы дикого типа

СЕССИЯ 5. БИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

методами молекулярной динамики, и был осуществлен поиск нестабильных регионов в белке. Полученные данные позволили проводить случайный и сайт-насыщающий мутагенез участков гена, кодирующих вариабельные нестабильные регионы глюкоамилазы. Такой подход позволял значительно сузить величину ДНК-библиотек и уменьшить трудоемкость эксперимента по направленной эволюции. С использованием такой методики нами было получено восемь мутантных форм глюкоамилазы с повышенной термостабильностью.

1. Aleshin A.E. *et al. J. Biol. Chem.* 1994, 269, 15631-15639
2. Sorimachi K. *et al. J. Mol. Biol.* 1996, 259, 970-987
3. Jørgensen A.D. *et al. J. Biol. Chem.* 2008, 283, 21. 14772-14780

Двухуровневая фрактальная организация хроматина в ядрах клеток HeLa

*Е. Г. Яшина^{1, 2}, М. В. Филатов², Р. А. Пантина², Е. Я. Варфоломеева²,
W. G. Bouwman³, С. Р. Duif³, V. Pipich⁴, D. Honecker⁵, 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

³ Delft University of Technology, Delft, The Netherlands

⁴ Jülich Centre for Neutron Science at FRM II, Garching, Germany

⁵ Institut Laue Langevin, Grenoble, France

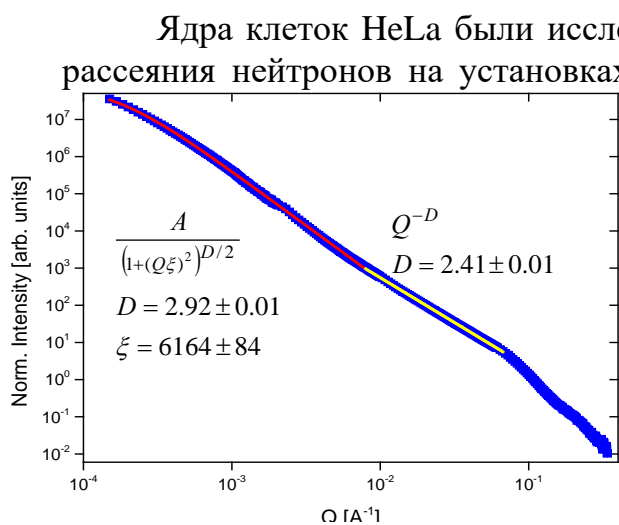


Рис.1 Малоугловое рассеяние нейтронов на ядрах HeLa в D2O более 95%.

Ядра клеток HeLa были исследованы методом классического малоуглового рассеяния нейтронов на установках KWS-3 (MLZ, Munich, Germany), D11 (ILL, Grenoble, France). Результаты обоих экспериментов представлены на рис. 1. Интенсивность малоуглового рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $[8 \cdot 10^{-2} \div 10^{-1}] \text{ nm}^{-1}$ описывается степенной функцией $I(Q) \sim Q^{-D}$ со степенью $D = 2.41 \pm 0.01$, и, соответствующая корреляционная функция равна $\gamma(r) = (r/\xi)^{-0.6}$, где ξ - корреляционная длина ядра, а в диапазоне $[10^{-4} \div 8 \cdot 10^{-2}] \text{ nm}^{-1}$ - со степенью $D = 2.92 \pm 0.01$, что свидетельствует о том, что корреляционная функция $\gamma(r) = \ln(r/\xi)$ [1]. Независимые измерения функции по спин-эхо МУРН (установка SESANS TU Delft)

демонстрируют экспоненциальный закон в диапазоне размеров $[10^2 - 10^4]$ нм и

корреляционный радиус ядра $\xi = 5.1 \pm 0.1 \text{ мкм}$ (рис. 2). Показано, что структурная организация хроматина в ядрах HeLa аналогична двухуровневой фрактальной организации хроматина в ядрах куриных эритроцитов [1]. При агломерации ядер HeLa со временем их структурный фактор представляет собой асимметричный корреляционный пик, описываемый функцией Лоренца в линейно-логарифмическом масштабе. При этом наблюдается ближний порядок на масштабах 1.1 мкм, что объясняется взаимнопроникновением ядер друг в друга на глубину порядка 1 микрона.

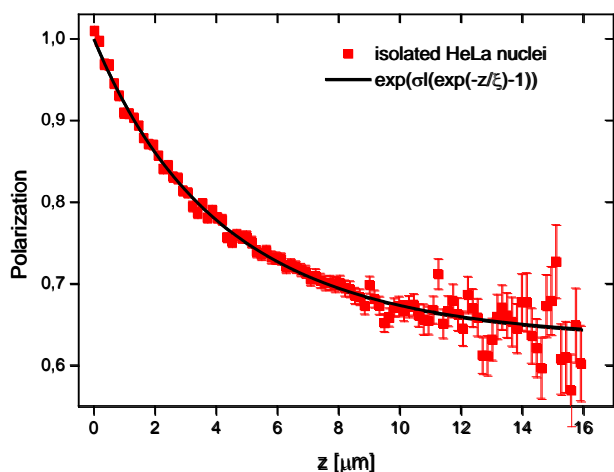
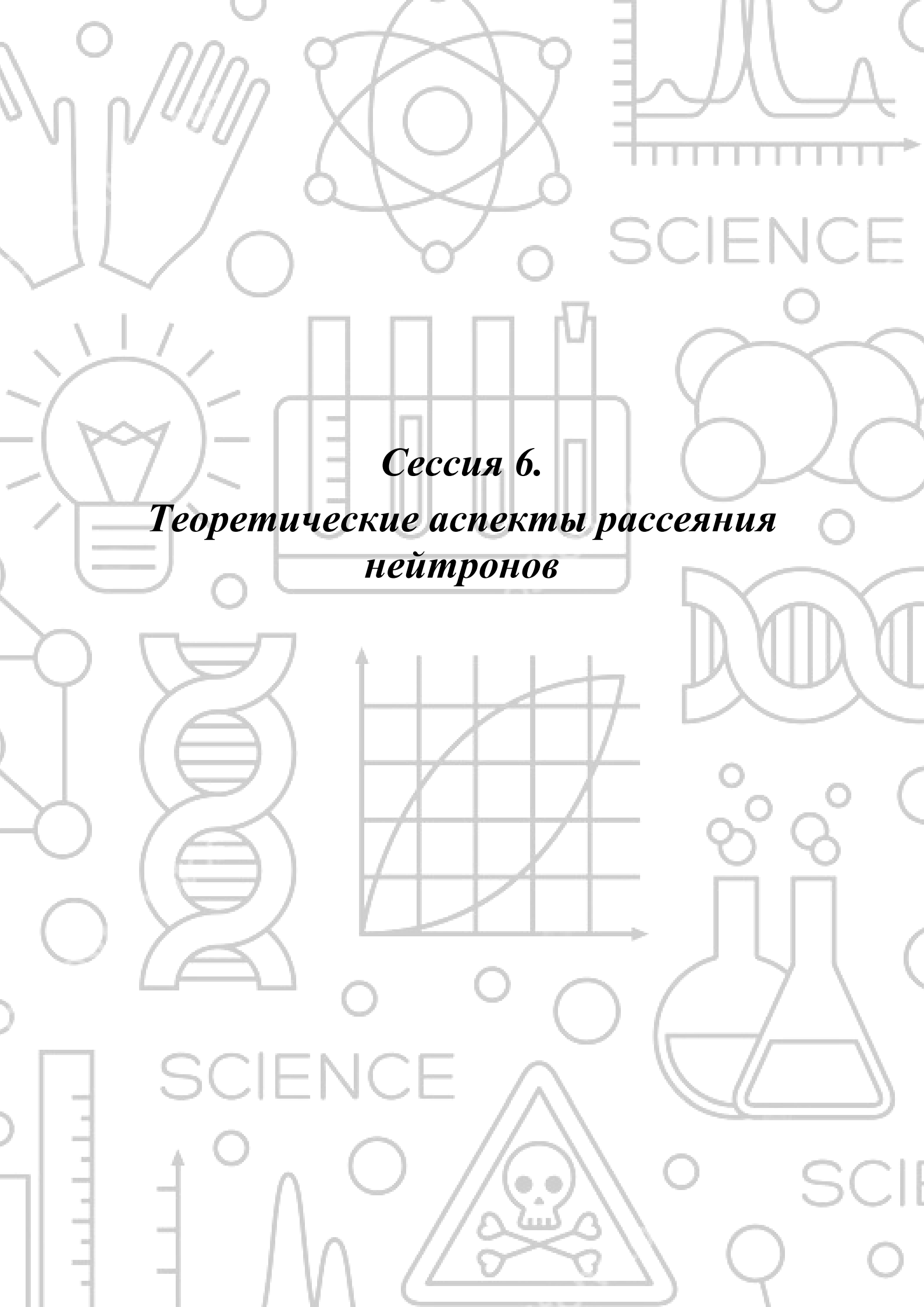


Рис.2 Спин-эхо малоугловое рассеяние нейтронов на изолированных ядрах HeLa в D2O более 95%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 17-02-00313 А).

1. E. G. Iashina, E. V. Velichko, M. V. Filatov, W. G. Bouwman, C. P. Duif, A. Brulet, S. V. Grigoriev, PHYSICAL REVIEW E **96**, 012411 (2017)



***Сессия 6.
Теоретические аспекты рассеяния
нейтронов***

Расчёт размерных распределений наночастиц по данным малоуглового рассеяния с оценкой стабильности решения

А. С. Козлова¹, В. В. Волков²

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

² *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

В связи с актуальностью нанотехнологий в современном мире широкое применение находят различные методы исследования строения наносистем, а именно, малоугловое рассеяние рентгеновского излучения. Неотъемлемой частью метода является обработка результатов с целью создания модели изучаемого объекта. Для решения этой задачи существуют специальные компьютерные программы, но в ряде случаев имеющиеся программы не позволяют с достаточной точностью определять необходимые структурные параметры изучаемого образца. В связи с этим до сих пор актуальна задача разработки методов для более точного и стабильного поиска параметров структурных моделей.

В данной работе рассмотрены алгоритмы, позволяющие находить более точные наборы структурных параметров, которые позволяют повысить достоверность вычисляемых моделей. В качестве модели в работе выступали объемные распределения наночастиц по размерам, которым соответствовала теоретическая интенсивность рассеяния, наилучшим образом описывающая экспериментальные данные по критерию наименьших квадратов. В силу плохой обусловленности такой задачи поиск решения не только необходимо осуществлять с помощью максимально эффективных алгоритмов, но и уметь оценивать степень нестабильности решения, то есть чувствительность параметров находимой модели к вариациям в исходных данных. Предлагаемый нами метод оценки состоит в определении разброса между решениями, полученными при варьировании углового диапазона данных рассеяния в небольших пределах, обычно 10-20%. Если решение стабильно, вариации среднего диаметра частиц между решениями не превышают 3-5%, полуширина распределения оказывается менее стабильной, в пределах 5-15%.

С помощью данного подхода были проведены исследования ряда растворов наночастиц стабилизированных кремнезольей в слабо- и сильнощелочной среде. Показано, что в сильнощелочной среде (0.3М CsOH) происходит образование геля с сохранением размерного распределения наночастиц вместо описанного в литературе их растворения. Этот пример позволяет качественно оценить преимущества предложенных алгоритмов и понять суть предлагаемой методики.

Теория многократного малоуглового рассеяния нейтронов при высокой концентрации неоднородностей вещества

Ф. С. Джебпаров, Д. В. Львов

*Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

Метод малоуглового рассеяния нейтронов широко применяется при исследовании объектов надатомных размеров. При исследованиях конденсированных сред часто не удается добиться преобладания однократного рассеяния путем уменьшения толщины твердотельного образца (при сохранении его структуры). В этом случае параметры неоднородностей образца необходимо определять из данных по многократному малоугловому рассеянию нейтронов (ММУРН). Для анализа данных ММУРН обычно используется теория Мольера. Эта теория верна при независимом расположении рассеивателей, ширина линии ММУРН при этом зависит от концентрации рассеивателей только через параметр кратности рассеяния.

В докладе излагается теория многократного малоуглового рассеяния нейтронов с учетом интерференции волн, рассеянных разными неоднородностями [1]. Проведено вычисление интенсивности рассеянных нейтронов в эйкональном приближении методом концентрационного разложения. Результаты кардинально отличаются от результатов теории Мольера при рассеянии на хаотически расположенном плотноупакованном ансамбле рассеивателей. Подробно рассмотрен дифракционный предел теории многократного малоуглового рассеяния нейтронов на плотной системе рассеивателей [2]. Обсуждаются принципиальные вопросы теории, в частности, возможность применимости концепции амплитуды рассеяния в задачах малоуглового рассеяния [3] и приложение теории для описания корреляционных эффектов в ММУРН на поверхностных слоях неоднородностей [4]. Приводятся экспериментальные результаты проверки теории, а также предлагаются новые эксперименты. Проведена оценка влияния интерференционных эффектов при определении размера неоднородностей из данных многократного малоуглового рассеяния нейтронов.

1. Ю.Г. Абов, Ф.С. Джебпаров, Н.О. Елютин, Д.В. Львов, А.Н. Тюлюсов, ЖЭТФ 143, 507 (2013).
2. Ф. С. Джебпаров, Д. В. Львов, Письма в ЖЭТФ 103, 16 (2016).
3. Ф.С. Джебпаров, Д.В. Львов, ФТТ 56, 142 (2014).
4. Е. В. Грубова, Ф. С. Джебпаров, Д. В. Львов, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 8, с. 12 (2016).

Новые приемы для решения обратных задач деконволюции, возникающих в микро-РФА

Д. С. Сороколетов, Я. В. Ракишун, Ф. А. Дарьин

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

Микро-РФА представляет собой перспективный метод анализа элементного состава объектов различной природы с разрешением от десятков нанометров до десятков и сотен микрометров. Особенности метода являются неразрушающий характер воздействия на образец и возможность исследования как его приповерхностных, так и заглубленных (на десятки и сотни мкм) областей. К настоящему времени разработан ряд подходов, учитывающих специфику образца и являющихся частью различных методик микро-РФА - как качественных, так и количественных, концентрационная чувствительность, пространственное разрешение и относительная простота применения которых сравнимы с конкурирующими с ними микронзондовыми способами элементного анализа (более развитыми и распространенными, но частично или полностью разрушающими объект исследования), таких как m-PIXE, ICP-AAS, ICP-MS [1].

Среди всех приложений микро-РФА можно выделить те, в которых возникает потребность в пространственном разрешении элементного анализа, лучше, чем то, что ограничено эффективным размером области фокуса используемых элементов рентгеновской оптики. К таковым можно отнести геохимические исследования флюидных и расплавных включений [2], россыпных вкраплений редкоземельных или благородных элементов в геологических породах, анализ распределения химических элементов в биологических клетках и микроорганизмах [3]. В подобных случаях составляется обратная задача деконволюции, которая плохо обусловлена, и она может быть решена с приемлемой точностью только в относительно благоприятных случаях, когда всевозможные погрешности, имеющие место в задаче, достаточно малы [4].

Нами был предложен ряд приемов для увеличения точности решения обратных задач деконволюции, возникающих в методе микро-РФА с улучшенным пространственным разрешением, специально для неблагоприятного случая, когда в качестве возбуждающего излучения применяется синхротронное излучение от накопителя второго поколения. Эффективность их применения была продемонстрирована на примере обработки результатов элементного картографирования двух образцов: области шлифа с рудой из комплекса Бушвельд, содержащей вкрапления палладия, и фрагмента человеческого волоса.

1. B. Beckhoff, B. Kanngießer, et al., Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis. (2006).
2. П.Ю. Плечов. Методы изучения флюидных и расплавных включений. М.: КДУ (2014).
3. F. Adams, EPJ Web of Conferences. 9 (2010), 165–180.
- P. Wrobel, M. Czyzycki, Talanta. 113 (2013), 62–67.

Метод стереографической проекции для описания динамики скирмионных спиновых систем

В. Е. Тимофеев, Д. Н. Аристов

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

Топологические дефекты в магнитных кристаллах представляют большой интерес для исследований. В последние годы вихревые периодические структуры наблюдают во множестве экспериментов [1,2]. В работе Белавина-Полякова (БП) [3] обсуждалось существование вихревых метастабильных решений в нелинейной $O(3)$ сигма-модели.

В данной работе рассматривается расширение модели, включающее взаимодействие Дзялошинского-Мории (ВДМ) и внешнее магнитное поле. В такой модели можно уйти от трёхмерного вектора намагниченности и переписать энергию в терминах функции комплексного переменного при помощи метода стереографической проекции. Тогда полюса функции комплексного переменного будут отвечать нетривиальному топологическому заряду. Ищется решение в виде модернизированного скирмионного решения БП, с дополнительным фактором, зависящим от ВДМ и величины магнитного поля.

Экспоненциальное убывание с расстоянием профильной функции одного скирмиона, а также интересное свойство масштабируемости решения для свободного скирмиона, позволяет нам обсуждать мультискирмионные конфигурации как сумму стереографических образов решений для индивидуальных скирмионов. Исследуется парное и непарное взаимодействия между скирмионами в плотной упаковке, что позволяет корректно рассчитать плотность энергии для решётки скирмионов.

Для обсуждения динамики конфигураций, строится лагранжиан в терминах коллективных переменных: положений центров скирмионов, радиусов отдельных скирмионов, эллиптических деформаций и т.д. Соответствующие уравнения Эйлера-Лагранжа позволяют найти характерные частоты различных возбуждений в рассматриваемых системах.

1. Mühlbauer, Sebastian, et al. Science 323.5916 (2009)
2. Yu, X. Z., et al. Nature 465.7300 (2010)
3. Belavin, A. A., and A. M. Polyakov, JETP Lett., 22, 245 (1975)

Спектр магнонов на сверхрешетке скирмионов

А. В. Цыпильников, Д. Н. Аристов

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

Исследование скирмионных решеток в киральных магнетиках привлекает всё больший интерес со стороны как теоретиков, так и экспериментаторов, поскольку существуют определенные идеи того, как можно использовать скирмионы в различных практических приложениях [1].

В большинстве теоретических работ на эту тему, авторы получают свои результаты посредством численного моделирования [2 – 4], что не очень удобно с точки зрения описания экспериментов по рассеянию, так как для их описания удобнее получить в явном виде функции Грина.

Мы определяем спектр магнонов на решетке скирмионов следующим образом [4 – 6]: сначала применяется метод ВКБ для одного скирмиона на диске с оптимальным радиусом, минимизирующим классическую энергию системы, с учетом изотропного гейзенберговского обмена, взаимодействия Дзялошинского – Мориа и внешнего магнитного поля, где уравнение Шредингера для магнонов в конфигурации с одним скирмионом удается вывести аналитически, однако спектр и волновые функции магнонов можно получить только численными методами. Полученное уравнение Шредингера переписывается в терминах вектор-потенциала некоего «эффективного магнитного поля» и таким образом оказывается, что задача о спектре магнонов в такой системе оказывается аналогичной задаче о спектре электрона в периодическом потенциале и в неоднородном магнитном поле.

Спектр и волновые функции магнонов рассчитанные таким образом используются для вычисления одночастичных функций Грина и получения восприимчивости решетки.

1. A. Fert, V. Cros and J. Sampaio. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures, *Nature Nanotechnology*, 8, 152 (2013).
2. Rößler, U. K., Bogdanov, N. & Pfleiderer, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals, *Nature*, 442 797–801 (2006).
3. F. N Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel & N. S. Kiselev. New spiral state and skyrmion lattice in 3D model of chiral magnets, *New J. Phys.*, 18, 045002 (2016).
4. A. Roldán-Molina, A. S. Nunez & J. Fernández-Rossier. Topological spin waves in the atomic-scale magnetic skyrmion crystal. *New J. Phys.*, 18, 045015, (2016).
5. D. N. Aristov & P. G. Matveeva. Stability of a skyrmion and interaction of magnons. *Physical Review B.*, 94, 214425, (2016).
6. C. Schütte & M. Garst. Magnon-skyrmion scattering in chiral magnets. *Phys. Rev. B* 90, 094423 (2014).

Влияние локальной анизотропии энергии спинов на устойчивость магнитной фазы A в хиральных кубических кристаллах

В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

Неоднократно подмечено, что магнитные структуры в хиральных кубических кристаллах типа $MnSi$ или Cu_2OSeO_3 сильно схожи с холестерическими жидкими кристаллами (ЖК). Так, наряду с одномерно закрученными геликоидальными фазами, и там и там наблюдаются структуры с двойной закруткой: в ЖК – голубые фазы, в хиральных магнетиках – фаза A , представляющая собой решётку линейных топологических дефектов – скирмионов.

Важным отличием магнетиков от ЖК, помимо симметрии параметра порядка, является то, что их магнитная структура погружена в периодическую матрицу кристалла. В частности, это позволяет описывать её в рамках микроскопического гейзенберговского подхода на решётке дискретных спинов, наравне с феноменологической теорией Ландау–Лифшица, в которой магнитная структура представлена континуальным полем намагниченности. Ранее была показана формальная связь этих двух подходов и, в частности, константы J (изотропный обмен) и D (взаимодействие Дзялошинского–Мории, ДМ) феноменологического приближения выведены из параметров межспиновых взаимодействий J_{ij} и \mathbf{D}_{ij} микроскопической теории [1,2].

Другим важным эффектом кристаллической структуры является наведённая ею анизотропия энергии спина. Моделирование *ab initio* раскрученной спиновой структуры кристаллов типа $B20$ ($MnSi$, $FeGe$) предсказывает, наряду со спиновыми скосами, связанными со взаимодействием ДМ, существование скосов вызванных локальной анизотропией атомной позиции. Эту анизотропию можно учесть, дополнив энергию членом, описывающим взаимодействие i -го спина с локальным кристаллическим полем:

$$E_{LA,i}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2}A_{i,\alpha\beta}s_\alpha s_\beta + \frac{1}{4}B_{i,\alpha\beta\gamma\delta}s_\alpha s_\beta s_\gamma s_\delta,$$

где тензоры A , B обладают симметрией атомной позиции (ось 3 в случае $MnSi$). При переходе к континуальному приближению возникает кубическая анизотропная поправка к энергии вида $\alpha(M_x^4 + M_y^4 + M_z^4)$, по порядку величины сравнимая с разницей энергий фазы A и конической спиральной магнитной структуры. Это приводит к дополнительному, отсутствующему в холестерических ЖК, механизму устойчивости фаз с двойной закруткой, что также подтверждается наблюдаемой в экспериментах анизотропией области существования фазы A в зависимости от направления приложенного магнитного поля.

1. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko, Phys. Rev. B 85, 014421 (2012).
2. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko, J. Mag. Mag. Mater. 382, 142 (2015).



***Сессия 7.
Источники нейтронов***

SCIENCE

SCIENCE

**Нейтронный комплекс реактора ИБР-2 как пользовательский центр
для исследований конденсированных сред:
текущее состояние и перспективы развития**

Д. П. Козленко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Представлен обзор текущего состояния комплекса спектрометров реактора ИБР-2, который в настоящее время включает в себя 15 установок, в том числе 8 дифрактомеров, 3 рефлектометра, 1 спектрометр малоуглового рассеяния нейтронов, 2 спектрометра неупругого рассеяния нейтронов и 1 спектрометр нейтронной радиографии и томографии [1]. Рассмотрены важнейшие методические результаты развития комплекса спектрометров в последние годы и планы дальнейшей модернизации установок. Они включают в себя замену нейтронновода и Фурье-прерывателя на Фурье-дифрактометре высокого разрешения, установку фокусирующего устройства на дифрактометре для исследования микрообразцов ДН-6, создание базовой конфигурации спин-эхо спектрометра малоуглового рассеяния, создание новой установки малоуглового рассеяния и нейтронного имиджинга на холодном замедлителе реактора ИБР-2 и др.

На протяжении более 5 лет, с момента запуска модернизированного реактора ИБР-2 на номинальной мощности 2 МВ в 2012 г., комплекс спектрометров работает в режиме пользовательского центра [2]. Заявки на проведение экспериментов принимаются дважды в год, решение о предоставлении пучкового времени принимается по результатам технической и научной экспертизы. Ежегодно в рамках пользовательской программы проводится около 230 экспериментов исследователями из более чем 15 стран.

1. <http://flnph.jinr.ru/ru/facilities/ibr-2/instruments>

2. <http://ibr-2.jinr.ru>

**Установка малоуглового рассеяния на компактном источнике нейтронов:
расчёты и перспективы**

К. А. Павлов^{1, 2}, П. И. Коник^{1, 2}, Н. А. Коваленко², 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

На сегодняшний день в ведущих мировых центрах нейтронных исследований ведётся разработка нового поколения источников нейтронов для нужд физики конденсированного состояния вещества. Компактные источники призваны заменить морально устаревающие реакторы малой и средней мощности и открыть возможности к созданию лаборатории нейтронного рассеяния в любой организации. Компактный источник изначально уступает несколько порядков нейтронного потока крупному источнику ускорительного типа, однако, по предварительным оценкам, часть потерь может быть отыграна за счёт увеличения апертуры захвата и глубокой оптимизации установок, включающей в себя адаптацию параметров ускорителя, мишени и замедлителя под нужды конкретной установки, использующей источник.

Малоугловое рассеяние является одним из самых востребованных нейтронных методов на сегодняшний день и в ближайшем будущем благодаря чувствительности к неоднородностям нано- и субмикромасштаба и широкому применению в междисциплинарных биофизических исследованиях. В докладе будет представлена концепция установки малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) для компактного источника DARIA, разрабатываемого в СПбГУ. Предложенная схема установки позволяет измерять малоугловое рассеяние по методу времени пролёта, используя импульсную временную структуру пучка источника, характеристики которой подобраны оптимальными для данных исследований. Разработана фокусирующая оптическая схема на эллиптических зеркалах, что возможно на компактных источниках благодаря малому размеру светящейся поверхности замедлителя. Такое решение позволяет использовать для малоугловых измерений нейтронный пучок широкой расходимости и проводить эксперименты с достаточной статистикой на малых образцах. В работе будут представлены расчётные параметры оптической схемы, приведена оценка доступного измерительного диапазона по q , вычислено приборное разрешение и сформулированы требования к время-пролётному детектору установки.

Линейный ускоритель ионов - драйвер компактного источника нейтронов

Г. Н. Кропачев, А. Л. Ситников, Т. В. Кулевой

Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия

Традиционно нейтроны получают на ядерных реакторах и «испарительных» (spallation) источниках на основе мощных протонных ускорителей. Оба типа требуют колоссальных финансовых затрат что определяет счетное количество подобных центров в мире и ограничивает их доступность для экспериментаторов.

Создание сети компактных источников нейтронов позволит обеспечить широкую доступность нейтронных пучков и связанный с этим рост качества экспериментов на ведущих источниках нейтронных пучков. В настоящее время действует и разрабатывается ряд компактных источников нейтронов на основе протонных ускорителей в США, Китае, Японии и Европе [1].

В докладе приводится обзор и сравнительный анализ характеристик современных энергетических установок на основе линейных ионных ускорителей, используемых в качестве источников нейтронов. Используя существующие наработки по созданию источников нейтронов, предлагается концепция компактного нейтронного генератора на базе линейного ускорителя протонов. Основные элементы компактного нейтронного генератора:

1. Ионный источник типа ЭЦР (на базе электронно-циклотронного резонанса);
2. Линейный ускоритель ионов непрерывного действия с током до 10 мА на энергию, обеспечивающую требуемый выход потока нейтронов. Как правило, подобный ускоритель состоит из двух секций: структуры с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой и структуры с трубками дрейфа;
3. Бериллиевая мишень. При использовании бериллиевой мишени важно не допустить рождения трития. Поэтому выходная энергия протонного пучка не должна превышать 13 МэВ.

На основе предложенной схемы предполагается создание многофункциональной ускорительной установки BELA (Multidiscipline Facility Based on ECR Ion Source and Linear Accelerator) в НИЦ "Курчатовский институт"-ИТЭФ и компактного источника нейтронов DARIA (Neutron Source Dedicated to Applied Research and Industrial Application) в СПбГУ и НИЦ "Курчатовский институт"-ПИЯФ, прототипа серийной установки для оснащения научных и образовательных центров Российской Федерации.

1. DARIA - compact neutron sources, Санкт-Петербург, 2017.

Приборная база и исследования на нейтронных пучках реактора ИР-8*В. Т. Эм**Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Реактор ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» является водо-водяным реактором бассейнового типа, который был введен в эксплуатацию в 1957 году с мощностью 1МВт. После реконструкции в 1981 году мощность была повышена до 8МВт и в настоящее время реактор, в основном, эксплуатируется на мощности 5-6МВт.

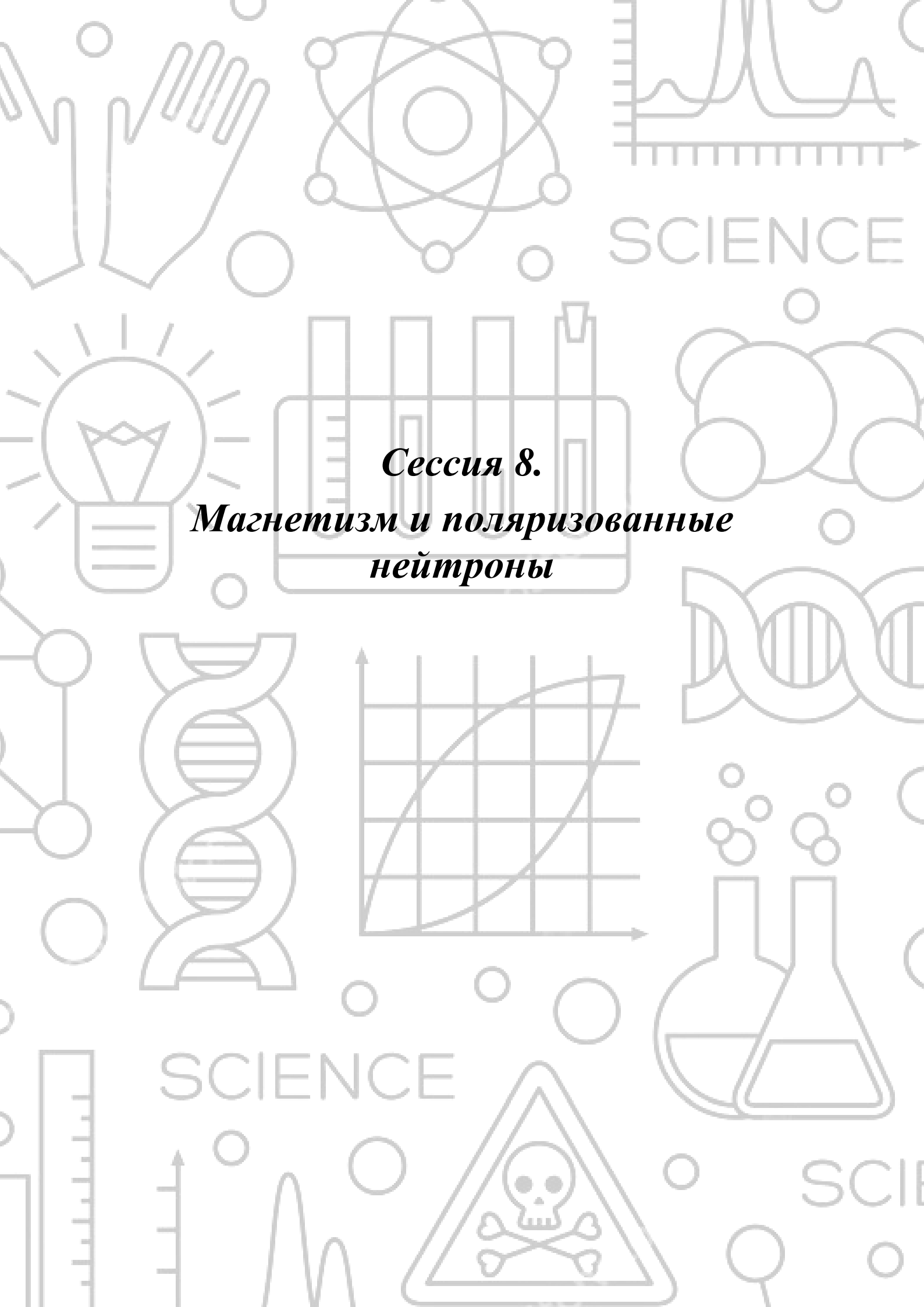
Реактор имеет 12 горизонтальных каналов для нейтронных исследований: 10 радиальных, один касательный и один «кривой». 7 каналов используются для исследований по физике твердого тела и 5 по ядерной физике. Реактор имеет сравнительно компактную активную зону с потоком $\sim 2 \cdot 10^{14}$ нсм⁻²с⁻¹. Благодаря короткой длине горизонтальных каналов (~ 2.5 м) поток нейтронов на выходе из радиальных каналов ($\sim 10^{10}$ нсм⁻²с⁻¹) сравним с потоком на более мощных средне-поточных реакторах.

Из-за сравнительно маленького экспериментального зала реактора и большого количества радиального типа горизонтальных каналов имеются проблемы с размещением установок и высоким уровнем фона. Поэтому для многих приборов оказывается оптимальным использование двойного монохроматора, что позволяет уменьшить фон и габаритные размеры установки поперек оси канала.

Имеются шесть действующих экспериментальных станций: порошковый дифрактометр ДИСК, монокристалльный дифрактометр МОНД, дифрактометр для исследования напряжений СТРЕСС, двухкристалльный дифрактометр ультра-малоуглового рассеяния СТОИК, трехосный спектрометр АТОС и станция нейтронно-гамма интроскопии ДРАКОН. Станции СТРЕСС и ДРАКОН были введены в строй в 2016 году. Остальные станции были созданы более 20 лет назад и модернизировались. Представлены технические характеристики установок и примеры исследований на них.

В настоящее время идут работы по созданию источника холодных нейтронов на основе жидкого водорода, который будет установлен в горизонтальный канал №10 реактора ИР-8, нейтронного зала и трех нейтронных залов. Эти работы планируется завершить в 2019 году. Ведутся также работы по созданию трёх установок на нейтронных пучках: малоугловая установка, порошковый дифрактометр и рефлектометр на поляризованных нейтронах. Монтаж этих установок на нейтронных пучках запланирован на 2020 год.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 16-12-10065.



Сессия 8.

***Магнетизм и поляризованные
нейтроны***

SCIENCE

SCIE

Finding the empty-beam-calibration for a SESANS setup in a beam line at PIK, on basis of measured fields

*W. H. Kraan*¹, *L. A. Akselrod*²

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

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

SESANS is a Spin-Echo (SE) Small-Angle-Neutron-Scattering (SANS) experiment with wavevector transfers in the order 10^{-6} - 10^{-3} nm⁻¹ in regions with magnetic field, shaped as *parallelograms*. Applying the *Satz*: for neutrons of wavelength λ the precession phase ϕ "collected" along a path of length L through a homogeneous field B is: $\phi = cLB/\lambda$, one can see that the collected phases ϕ_i in SE-arm 1 *before* ($i=1$) and in arm 2 *after* scattering ($i=2$) in the sample while a neutron traverses the regions, are:

$$\phi_i \approx \lambda (cBL + \Gamma\psi_i) \quad (i=1,2) \quad (c = 4\pi \mu_n m_n / h^2 = 4.632 \cdot 10^{14} \text{ T}^{-1}\text{m}^{-2}) \quad (1)$$

with μ_n , m_n , h neutron mass, magn. moment, Planck's constant, respectively and ψ_i the angles of the flying directions with respect to the beam axis through the SE-arms. $\lambda \Gamma\psi_i$ is the angle labeling term. For parallelograms with homog. field B and wedge angle θ_0 , $\Gamma = cBL \cot \theta_0$. Suppose a neutron is scattered by $\psi_2 - \psi_1 = \theta_s$ in horizontal (y) direction. Then Eq.(1) gives the precession *offset* $\phi_1 - \phi_2$ from Spin-Echo due to this process: $\phi_1 - \phi_2 = \lambda \Gamma \theta_s$. It has wavevector transfer $Q_y = (4\pi/\lambda) \sin(\theta_s/2) \approx 2\pi \theta_s/\lambda$. If we divide the offset by Q_y , we get a quantity of dimension length: $\delta = \lambda \Gamma \theta_0 / Q_y = \Gamma \lambda^2 / 2\pi$, called "spin-echo length". δ depends on the instrument parameters and on λ .

In the SESANS option discussed here, each of the two precession regions consists of:

- (1) at the beginning and end of the "parallelogram" a DC magnet with gap 75 mm, poles shaped at $\theta_0=33.7^\circ$ ($\cot \theta_0=1.5$) each containing an adiab/RF/grad.flipper;
- (2) the path length (≈ 1 m) between these magnets without field (but effectively $\approx 2B$).

In the last 5 years we made software to calculate the precession and the "collected" precession phase in *one* such region and in the full setup-without-sample - for one trajectory with given direction parameters $\{\psi, \zeta\}$, start height z_0 and λ - and for a "beam" of trajectories. At present, the DC magnets and the coils for these flippers exist; we measured the fields and inserted the results in the precession software.

Defining as "beam" a set of 441 trajectories through two narrow slits - 10 mm high - positioned before and behind the precession regions (i.e. 5 m apart), the output shows that for $\lambda=1$ nm, using these adiab/RF/grad flippers operated at 1 MHz (DC field $B=0.0343$ T) we can access $\delta=12$ mikron, with empty-beam-polarisation $P_0 \sim 0.25$.

One reason for this moderate polarisation is the inhomogeneity of the field of the DC magnets, giving line integrals increasing with z^2 away from the symmetry plane $z=0$. Earlier we found that this effect is greatly (not fully) annihilated by the spin-flip happening in each magnet. We will demonstrate that this annihilation can be improved by proper positioning of the DC magnets along the beam line.

Измерение спин-волновой жесткости в кубических гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов

*С. В. Григорьев^{1, 2}, К. А. Пшеничный^{1, 2}, Е. В. Алтынбаев^{1, 2},
S.-A. Siegfried³, A. Heinemann³*

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

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

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Мы разработали методику измерения жесткости спиновых волн в гелимагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория в состоянии, полностью намагниченном внешним полем с помощью малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов [1]. Экспериментально доказано, что дисперсия магнонов в этом состоянии имеет анизотропный вид, поскольку картина интенсивности рассеяния нейтронов представляет собой два круга для нейтронов с получением и потерей энергии магнона, соответственно. Центры кругов смещены на величину переданного импульса, равного волновому вектору спирали $\pm \mathbf{k}_s$, который ориентирован вдоль приложенного магнитного поля \mathbf{H} . Радиус кругов напрямую связан с жесткостью спиновых волн магнитной системы, но зависит от величины магнитного поля. Это рассеяние зависит от поляризации нейтронов, показывающей киральный характер спиновых волн в гелимагнетике Дзялошинского-Мория в поляризованной фазе.

Нами измерена температурная зависимость жесткости спиновых волн целого ряда соединений кубических гелимагнетиков с взаимодействием Дзялошинского-Мория: MnSi [1], $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ с $x = 0.03, 0.06, 0.09, 0.10$ [2], $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с $x = 0.25, 0.30, 0.50$ [3], FeGe [4], $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с $x = 0.80$ [5] и другими концентрациями $x = 0.10, 0.20, 0.30$, а также соединение Cu_2OSeO_3 .

Авторы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант # 17-12-01050).

1. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, P. Kizhe, and S. V. Maleyev, Phys. Rev. B 92, (2015) 220415(R).
2. S.V. Grigoriev, E.V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, K. A. Pshenichnyi, D. Menzel, A. Heinemann, and G. Chaboussant, Phys. Rev. B 97 (2018) 024409.
3. С. В. Григорьев, К.А.Пшеничный, Е. В.Алтынбаев, С.-А. Зигфрид, А.Хайнеманн, Д. Хоннекер, Д. Мензель, Письма в ЖЭТФ, том 107, вып. 10, (2018) с. 673 – 678.
4. 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.
5. S. V. Grigoriev, E. V. Altynbaev, S.-A.Siegfried, K. A. Pshenichnyi, D. Honnecker, A. Heinemann, A. V. Tsvyashchenko, JMMM 459 (2018) 159-164.

Взаимодействие Дзялошинского-Мория в мультиферроиках RMn_2O_5 *И. А. Зобкало¹, С. В. Гаврилов¹, А. Н. Матвеева¹, А. Sazonov², V. Hutani²*¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*² *Institute of Crystallography, RWTH Aachen University and Jülich Centre for Neutron Science at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Garching, Germany*

Методами дифракции поляризованных нейтронов проведены исследования температурной и полевой эволюции магнитного упорядочения в монокристаллах TbMn_2O_5 , NdMn_2O_5 , $\text{Nd}_{0.8}\text{Tb}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$. Во всех соединениях наблюдалось киральное рассеяние, свидетельствующее об эффективном вкладе антисимметричного взаимодействия.

Магнитный порядок в TbMn_2O_5 характеризуется несколькими сменяющимися друг друга фазами - высокотемпературной несоразмерной, при $T_{\text{CP}} < T < T_{\text{N}}$ ($T_{\text{CP}} = 35 \div 37$ К, $T_{\text{N}} = 45$ К), соразмерной при $T_{\text{LTIC}} < T < T_{\text{CP}}$ ($T_{\text{LTIC}} = 20 \div 24$ К) и низкотемпературной несоразмерной, при $T < T_{\text{LTIC}}$ [1]. Ферроэлектрическое упорядочение в TbMn_2O_5 также можно представить в виде последовательно сменяющихся друг друга фаз в тех же температурных диапазонах, при этом несоразмерным магнитным фазам соответствуют слабо-ферроэлектрические фазы, а соразмерной магнитной – ферроэлектрическая фаза с более сильной поляризацией [2]. В TbMn_2O_5 киральное рассеяние присутствует во всех магнитоупорядоченных фазах [1].

В отличие от TbMn_2O_5 , в мультиферроике NdMn_2O_5 киральное рассеяние наблюдалось только ниже температуры $T \sim 20$ К, т.е. при этой температуре происходит переход от несоразмерной некиральной магнитной фазы в киральную [3]. Температура этого кирального перехода соответствует температуре ферроэлектрического перехода T_{CE} [4], при этом величина ферроэлектрической поляризации очень мала.

Внешним электрическим полем удавалось изменить соотношение «правых» и «левых» спиралей в кристаллах TbMn_2O_5 , NdMn_2O_5 , $\text{Nd}_{0.8}\text{Tb}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$, что служит еще одним подтверждением «антисимметричного» магнитного происхождения ферроэлектрической поляризации.

Проведенные нами исследования свидетельствуют о наличии антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мория в RMn_2O_5 , которое не только оказывает влияние на формирование магнитного упорядочения, но также опосредованно может быть источником ферроэлектрического порядка в этих соединениях.

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

1. I. A. Zobkalo, S. V. Gavrilo, et al., J. Phys.: Condens. Matter 30, 205804 (2018).
2. Y. Noda, H. Kimura et al., J. Phys.: Condens. Matter 20, 434206 (2008).
3. I. A. Zobkalo, A. N. Matveeva, et al., Подготовлена к печати, (2018).
4. S. Chattopadhyay, V. Baledent, et al., Phys. Rev. B 93, 104406 (2016).

Оптическая теорема и некоторые результаты малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов ферромагнитными сплавами*А. В. Ковалев**Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

При изучении природы эффекта, само существование которого до 2003 г. считалось невозможным, обнаружилась необходимость согласования полученных экспериментальных данных с общей формулировкой оптической теоремы. Действительно, амплитуда рассеяния нейтрона магнитным атомом $F^\pm = F_N \pm F_M$ зависит от взаимной ориентации их магнитных моментов (магнитно-ядерная интерференция). Поэтому для интегральных интенсивностей Q^\pm малоуглового рассеяния намагниченным образцом должно выполняться условие $Q^+ > Q^-$ (Q^+ и Q^- измерены для противоположных направлений спина нейтрона в первичном пучке). Но детекторная система регистрирует и нейтроны, прошедшие через образец без рассеяния, что, казалось бы, должно привести к одинаковым результатам измерений Q^+ и Q^- . Однако при некоторых режимах отжига сплава $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ были обнаружены большие отличия этих интенсивностей [1]. Еще большие отличия интенсивностей центральных пиков наблюдались на сплаве ЮНДК [2] с периодической структурой, полученной методом спинодального распада.

Причиной таких эффектов предлагалось считать интерференцию прямых и рассеянных нейтронных волн в области расходимости прямого пучка, которая приводит к разным величинам изотропного рассеяния нейтронов с противоположными направлениями спинов [3]. Все полученные нами результаты соответствуют первой части предложенной гипотезы. Однако оптическая теорема будет выполняться, если результатом такой интерференции будут соответствующие изменения пространственных распределений нейтронов, рассеянных «назад». Наша схема представляется более реалистичной, так как похожие явления существуют при всех дифракционных и рефлектометрических измерениях, результаты которых кажутся простыми и понятными.

К настоящему времени для двух типов сплавов получено много новых результатов, которые полезно учитывать при изучении процессов формирования наноразмерных магнитных неоднородностей в разных образцах.

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. А. В. Ковалев. Междунар. научн. конф. «Актуальные проблемы физики твердого тела». Сб. докл. Минск (2016). Т. 1. С. 30.

3. В. Р. Toperverg. Physica B **335**, 174 (2003).

Исследование и применение плоских нейтронных волноводов

С. В. Кожевников¹, В. Д. Жакетов¹, Ю. Н. Хайдуков^{2, 3},
Т. Келлер^{2, 3}, Ф. Отт⁴, Ф. Раду⁵

¹ Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Max Planck Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Germany

³ Max Planck Society Outstation at FRM-II, Garching, Germany

⁴ Laboratoire Léon Brillouin CEA/CNRS, IRAMIS, Université Paris-Saclay, Gif sur Yvette, France

⁵ Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Berlin, Germany

Плоские волноводы представляют собой трёхслойную плёнку с нейтронно-оптическим потенциалом в виде ямы, которая преобразует стандартный нейтронный пучок в узкий микропучок шириной порядка 1 мкм и расходимостью около 0.1° . Поляризованный микропучок был использован для пространственного сканирования магнитной микроструктуры в объёме вещества [1]. При этом угловая расходимость [2] и спектральная ширина [3] микропучка определяют разрешение метода зондовой нейтронной микроскопии. В работе [4] описана экспериментальная установка для исследования длины каналирования нейтронов, которая была измерена в зависимости от толщины верхнего слоя и порядка резонанса в работе [5] и от глубины потенциальной ямы в работе [6]. Резонансное усиление нейтронной плотности и каналирование были использованы для прямого определения намагниченности слабомагнитной плёнки TbCo₅ в работе [7].

В данном докладе представлен обзор новых результатов, полученных нами за последний год. Мы исследовали угловую расходимость нейтронного микропучка в зависимости от ширины волноводного канала, используя рефлектометры с постоянной длиной волны [8] и по времени пролёта [9]. В работе [10] была измерена длина каналирования нейтронов в зависимости от ширины волноводного канала. В работе [11] методом каналирования поляризованных нейтронов мы исследовали магнитную плёнку TbCo₁₁.

Работа поддержана научным проектом ОИЯИ-Румыния № 323/21.05.2018, пункты 89 и 90.

1. С. В. Кожевников, Ф. Отт и др., Физика твёрдого тела 56, 63 (2014).
2. S. V. Kozhevnikov, V. K. Ignatovich, et al., Pis'ma v ZhETF 102, 3 (2015).
3. С. В. Кожевников, В. К. Игнатович и др., ЖЭТФ 150, 1094 (2016).
4. S. V. Kozhevnikov, T. Keller, et al., Nucl. Instr. and Meth. A 875, 177 (2017).
5. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов и др., ЖЭТФ 152, 1192 (2017).
6. С. В. Кожевников, Ю. Н. Хайдуков и др., ЖЭТФ 153, 712 (2018).
7. S. V. Kozhevnikov, Yu. N. Khaydukov et al., Pis'ma v ZhETF 103, 38 (2016).
8. S. V. Kozhevnikov, V. D. Zhaketov, T. Keller, Yu. N. Khaydukov, F. Ott, F. Radu, Divergence of neutron microbeams from planar waveguides, Nucl. Instrum. and Meth. A (2018), направлено.
9. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов, Ф. Раду, Нейтронный микропучок из плоского волновода, ЖЭТФ (2018), направлено.
10. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов, Ю. Н. Хайдуков, Т. Келлер, Ф. Отт, Ф. Раду, Каналирование нейтронов в немагнитном плоском волноводе, ЖЭТФ (2018), готовится к печати.
11. S. V. Kozhevnikov, V. D. Zhaketov, T. Keller, Yu. N. Khaydukov, F. Ott, F. Radu, Polarized neutron channeling in weakly magnetic films, Nucl. Instr. and Meth. A (2018), готовится к печати.

Изучение спиновых корреляций в $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ методом рассеяния поляризованных нейтронов

А. Н. Коршунов, А. И. Курбаков, С. Ю. Подчерзцев

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

Изучение механизмов формирования нетривиальных основных состояний в низкоразмерных магнетиках является актуальной задачей современной физики магнетизма. В системах с пониженной размерностью квантовая суть материи проявляется наиболее ярко, и становится возможным экспериментально наблюдать квантовые кооперативные эффекты. Нейтроны, благодаря своим уникальным свойствам, позволяют получить прецизионную информацию о внутреннем строении вещества, а за счет поляризационного анализа становится возможным выделить вклады от рассеяния на кристаллической структуре и магнитной решетке.

Настоящая работа посвящена изучению магнетизма в слоистом соединении $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, в котором реализовано сотообразное упорядочение магнитных ионов Ni^{2+} в высокоспиновой конфигурации ($S = 1$). Измерения магнитной восприимчивости и теплоемкости показали наличие антиферромагнитного фазового перехода с характерной температурой $T_N = 27$ К. Высокотемпературная часть магнитной восприимчивости с хорошей степенью точности описывается законом Кюри-Вейса с температурой Вейса, принимающей значение $\theta = -20$ К, что говорит о тонком балансе между ФМ и АФМ обменными взаимодействиями в исследуемой системе. Кроме того, проведенные макроизмерения указывают на наличие сильных спин-спиновых корреляций выше точки фазового перехода, что ранее также встречалось в подобных низкоразмерных магнетиках. По результатам нейтронной порошковой дифракции было установлено, что при понижении температуры в системе возникает дальний магнитный порядок ниже T_N и появляются дополнительные рефлексy, индицируемые с вектором распространения $k = (1/2 \ 0 \ 0)$.

Последующий анализ возможных неприводимых представлений показал, что наиболее предпочтительной является магнитная структура типа «зигзаг» с преимущественным направлением магнитных моментов перпендикулярно сотообразным слоям. Такое антиферромагнитное основное состояние является результатом сложной конкуренции обменных взаимодействий между ближайшими и более дальними соседями в сотовых слоях. Также было замечено наличие широкого диффузного магнитного пика на нейтронограммах выше T_N , что также свидетельствует о наличии спиновых корреляций. Использование рассеяния поляризованных нейтронов на установке DNS (MLZ, Германия) позволило выделить магнитный вклад (при $T = 30$ К) и провести дальнейший анализ данных с использованием обратного метода Монте-Карло. В результате была восстановлена спиновая парная корреляционная функция и сделаны выводы о роли корреляций при формировании дальнего магнитного порядка.

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

Особенности магнетизма в $\text{Dy}_{1-x}\text{Ho}_x\text{MnO}_3$

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

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

² *RWTH Aachen University, Garching, Germany*

Сильное магнитоэлектрическое взаимодействие в перовскитных оксидах марганца RMnO_3 приводит к появлению сегнетоэлектрической поляризации, индуцированной специфическим типом магнитного упорядочения. В TbMnO_3 , DyMnO_3 и GdMnO_3 сегнетоэлектрическое упорядочение порождается циклоидальной спиновой структурой марганцевой подсистемы, что удовлетворительно описывается на основе взаимодействия $[\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]$ -типа [1]. В HoMnO_3 и YMnO_3 механизм происхождения сегнетоэлектрической поляризации – другой, обусловлен симметричным обменом ионов марганца $[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]$ -типа [2]. Недавние теоретические и экспериментальные работы показали, что редкоземельный магнетизм, который часто не принимается во внимание в вышеупомянутых двух механизмах, не является пренебрежимо малым для формирования мультиферроизма в RMnO_3 [3].

С целью изучения связи между редкоземельной и марганцевой магнитными подсистемами и последовательного изучения влияния типа редкоземельных ионов на магнитный порядок в мультиферроиках $\text{Dy}_{1-x}\text{Ho}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.2$) были проведены эксперименты по дифракции нейтронов, в том числе, с использованием поляризованных нейтронов.

Измерения выполнены на дифрактометрах HEIDI и POLI в MLZ (Гархинг, Германия). Температурные зависимости магнитных параметров обоих исследованных соединений демонстрируют значительную зависимость от режима измерений (нагрев/охлаждение), что можно интерпретировать как очень нетривиальный температурный гистерезис, обусловленный взаимодействием двух магнитных систем – марганцевой и редкоземельной. Однако вид этого гистерезиса различается для DyMnO_3 и $\text{Dy}_{0.8}\text{Ho}_{0.2}\text{MnO}_3$, что более ярко свидетельствует о сильном влиянии редкоземельной магнитной подсистемы на марганцевую в «родительском» соединении, чем в замещенном $\text{Dy}_{0.8}\text{Ho}_{0.2}\text{MnO}_3$.

Обращение спиновой киральности $\mathbf{C}=[\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]$ в соответствии с \mathbf{E} -индуцированным обращением поляризации \mathbf{P} было подтверждено экспериментально путем измерения рассеяния поляризованных нейтронов.

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

1. I.A. Sergienko, E. Dagotto, Phys. Rev. B 73, (2006) 094434.
2. Sergienko, I. A., Sen, C. & Dagotto, E. Phys. Rev. Lett. 97, 227204 (2006).
3. Zhang, N. et al. Appl. Phys. Lett. 99, 102509 (2011).

Об измерении спин-волной жесткости в гелимагнетиках Cu_2OSeO_3 методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов

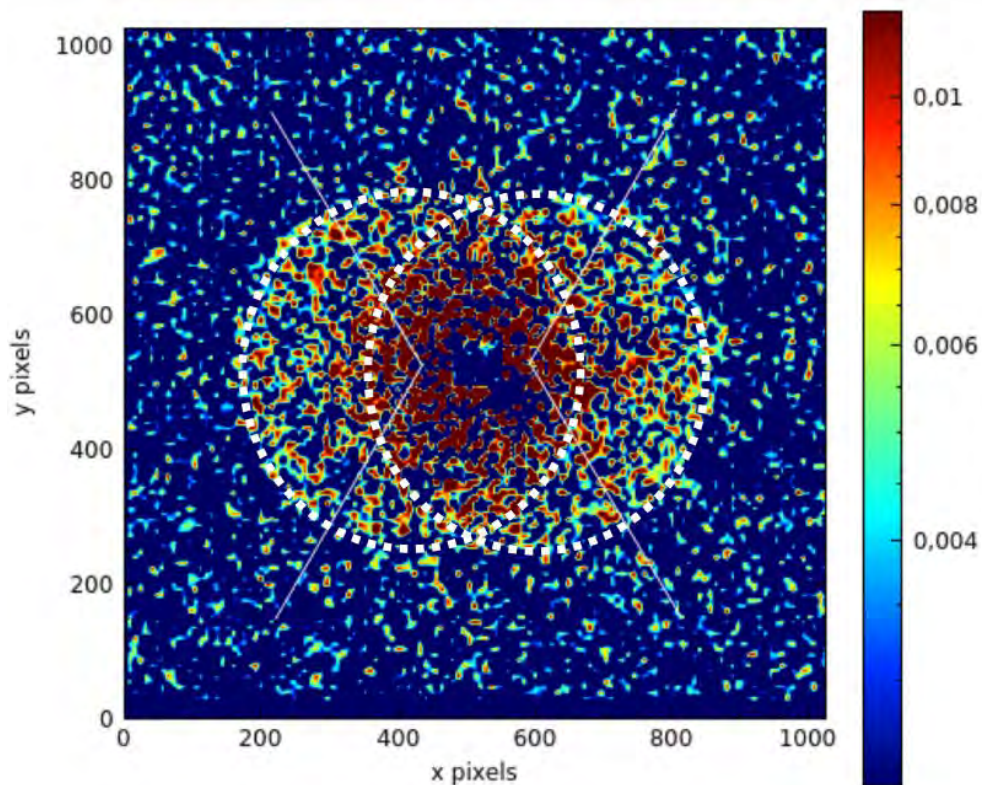
К. А. Пшеничный^{1,2}, Е. В. Алтынбаев^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}, А. Хейнеман³

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

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

³ Maier-Leibnitz Zentrum, Garching, Germany

Методом малоуглового рассеяния нейтронов измерена спин-волновая жесткость в геликомагнетике с взаимодействием Дзялошинского–Мория Cu_2OSeO_3 в состоянии, полностью намагниченном внешним полем. Показано, что дисперсия магнонов в этом состоянии имеет анизотропный вид, поскольку картина рассеяния нейтронов представляет собой два круга для нейтронов с получением и потерей энергии магнона соответственно. Центры кругов смещены на величину переданного импульса, ориентированного вдоль приложенного магнитного поля H и равного волновому вектору спирали $\pm k_s = 0.1 \text{ нм}^{-1}$. Радиус кругов напрямую связан с жесткостью спиновых волн магнитной системы, но зависит от величины магнитного поля. Показано, что эффективная спин-волновая жесткость A для геликомагнетика равна $75.1 \text{ мэВ}\text{А}^2$ при $T = 0 \text{ К}$ и слабо (на 17 %) убывает с ростом температуры вплоть до критической $T_c = 58 \text{ К}$.



Карта малоуглового рассеяния нейтронов от образца Cu_2OSeO_3 при значении приложенного поля 0.3 Т и при температуре 30 К .

Авторы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант # 17-12-01050).

Исследование нейтронного мультимонохроматора-биполяризатора на основе магнитной Fe/Co многослойной структуры

В. Г. Сыромятников^{1, 2}, А. Воробьев³, С. Schanzer⁴

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 *Institut Laue Langevin, Grenoble, France*

⁴ *SwissNeutronics AG, Klingnau, Switzerland*

В работе [1] предложен новый нейтронно-оптический элемент - Нейтронный Мультимонохроматор-Биполяризатор (НМБ). Он состоит из многослойной структуры, состоящей из 12 периодических многослойных магнитных наноструктур Fe / Co, для которых период увеличивается при удалении с подложки от 50 до 146 Å.

Для НМБ, как показано в [1], на графике зависимости коэффициента отражения обеих спиновых компонент пучка от переданного импульса видна последовательность из 24-х чередующихся плотно расположенных, но не перекрывающихся брэгговских пиков с противоположной поляризацией и с коэффициентами отражения близкими к 1. В работе [1] предложена новая схема полного нейтронного поляризационного анализа для время-пролетного метода с применением НМБ в качестве поляризатора. В этой схеме спин-флиппер перед образцом не используется. Использование НМБ возможно в установках SESANS, для исследования малоуглового и неупругого рассеяния поляризованных нейтронов, рефлектометрах поляризованных нейтронов.

В докладе представлены результаты измерений зеркального отражения и диффузного рассеяния обеих спиновых компонент пучка на образце НМБ, изготовленном в *SwissNeutronics*. Для НМБ на экспериментальном графике зависимости коэффициента отражения обеих спиновых компонент пучка от переданного импульса все 24 пика хорошо различимы и их координаты близки к расчетным. Яркая картина диффузного рассеяния показана на контурных картах в координатах входного и выходного углов скольжения для каждой спиновой компоненты пучка. На обеих картах представлены и хорошо разрешены все 12 полос квазибрэгговского диффузного рассеяния.

Результаты получены на нейтронном рефлектометре СуперАДАМ (ИЛЛ, Гренобль, Франция).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, Соглашение №14.607.21.0194 от 26 Сентября 2017г., RFMEFI60717X0194.

1. V.G. Syromyatnikov, Kyaw Zaw Lin. Neutron multimonochromator-bipolarizer based on magnetic multilayer Fe/Co and new scheme for the total neutron polarization analysis. J. Phys.: Conf. Ser. **862** (2017) 012016 (16 pages).

Особенности формирования когерентной спиновой спирали в гольмий-иттриевой сверхструктуре

В. Уклеев¹, В. В. Тарнавич², P. Gargiani³, M. Valvidares³, V. Kapaklis⁴

¹ *Laboratory for Neutron Scattering and Imaging (LNS), Paul Scherrer Institute (PSI), Villigen, Switzerland*

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

³ *ALBA Synchrotron Light Source, Cerdanyola del Vallès, Barcelona, Spain*

⁴ *Uppsala University, Uppsala, Sweden*

Гольмий-иттриевые сверхрешётки, представляющие собой многослойную металлическую структуру с чередующимися магнитными Ho и немагнитными Y слоями, ниже температуры магнитного упорядочения $T_N = 131$ К демонстрируют спиновую спираль, когерентно проникающую через несколько бислоёв Ho/Y [1]. Ранее было установлено, что внешнее магнитное поле, приложенное в плоскости плоскости ab ГПУ решетки Ho (плоскости плёнки), индуцирует нарушение киральной симметрии геликоидальной структуры и киральность когерентно распространяется через слои иттрия [2].

Актуальные исследования посвящены исследованию влияния иттрия, являющегося Паулевским парамагнетиком, на поведение когерентной спиновой гелиокиды методом рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD) и резонансного рассеяния мягкого рентгена (RSXS). Эксперименты проведены на линии спектроскопии и резонансного рассеяния мягкого рентгеновского излучения BL29 BOREAS (синхротрон ALBA, Испания). Спектры XMCD были получены измерением полной электронной эмиссии (TEY) в окрестности $L_{2,3}$ краёв поглощения Y в магнитном поле 60 кЭ при температуре 2 К. Установлено, что интенсивность поглощения не зависит от поляризации излучения, что говорит об отсутствии индуцированного магнитного момента в слоях Y. В то же время, на кривой рассеяния мягкого рентгена на L_3 краю Y ниже T_N наблюдается пик, не соответствующий периоду сверхрешётки и магнитной спирали в Ho. Более того, интенсивность пика слабо зависит от энергии излучения вблизи резонансных условий, что свидетельствует о том, что связь между двумя соседними слоями Ho и формирование когерентной спиновой спирали реализуется за счет волны зарядовой плотности электронов проводимости Y-го слоя, а не за счет волны спиновой плотности, как утверждалось ранее [1].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00005 мол_а. Эксперименты по спектроскопии и рассеянию мягкого рентгена были выполнены на синхротроне ALBA в рамках пропозала No.: 2017092410. Финансовая поддержка В.У. осуществлялась в рамках проекта SNF Sinergia CDSII5-171003 NanoSkyrmionics.

1. J. J. Rhyne and R.W.Erwin, Handbook of Magnetic Materials Vol. 8, 1995, P. 1-57

2. V. V. Tarnavich, D. Lott, et al., Phys. Rev. B 89, 054406 (2014).

3. V. Tarnavich, E. Tartakovskaya, et al., Phys. Rev. B 96, 014415 (2017).

О роли критических флуктуаций геликоидальной структуры в формировании скирмионной решётки в FeGe

Н. М. Чубова¹, А. Heinemann², А. Цвященко³, С. В. Григорьев^{1, 4}

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

² *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

³ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

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

Методом малоугловой дифракции нейтронов изучена область (H - T) фазовой диаграммы вблизи $T_C = 278,4$ К ($H = 0-0.4$ Тл) поликристаллического образца кубического нецентросимметричного геликоидального магнетика FeGe. Магнитное поле прикладывали перпендикулярно падающему пучку нейтронов. Выбранная геометрия эксперимента позволяет визуализировать одновременно три различных магнитных состояния системы [1]:

- 1) критические флуктуации с волновым вектором спирали $k_f = 0,090(1)$ нм⁻¹, случайно ориентированным в пространстве (рис. а);
- 2) коническую структуру с $k_c = 0,086(1)$ нм⁻¹ ($\mathbf{k}_c \parallel \mathbf{H}$) (рис. б);
- 3) гексагональную скирмионную решётку с $k_h = 0,084(1)$ нм⁻¹ ($\mathbf{k}_h \perp \mathbf{H}$) (рис. б).

Скирмионная решётка и коническая структура одновременно наблюдаются как ниже, так и выше T_C на фоне критических флуктуаций. Критические флуктуации спирали обнаружены в диапазоне от 277 К до 278,9 К как в нулевом поле, так и в полях, при которых возникает скирмионная решетка (порядка 0,2 Тл). Сделан вывод о том, что формирование скирмионной решётки обусловлено наличием критических флуктуаций геликоидальной структуры, что совпадает с результатами, полученным для MnSi [1].

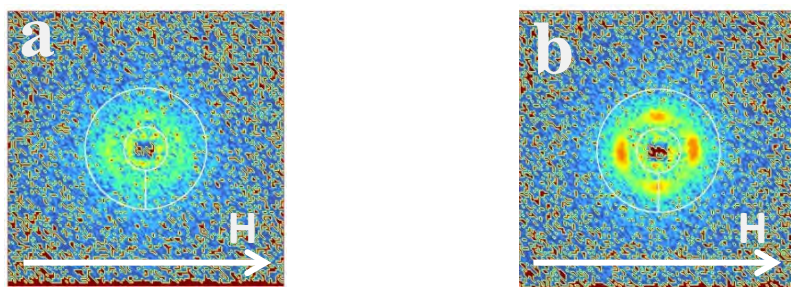
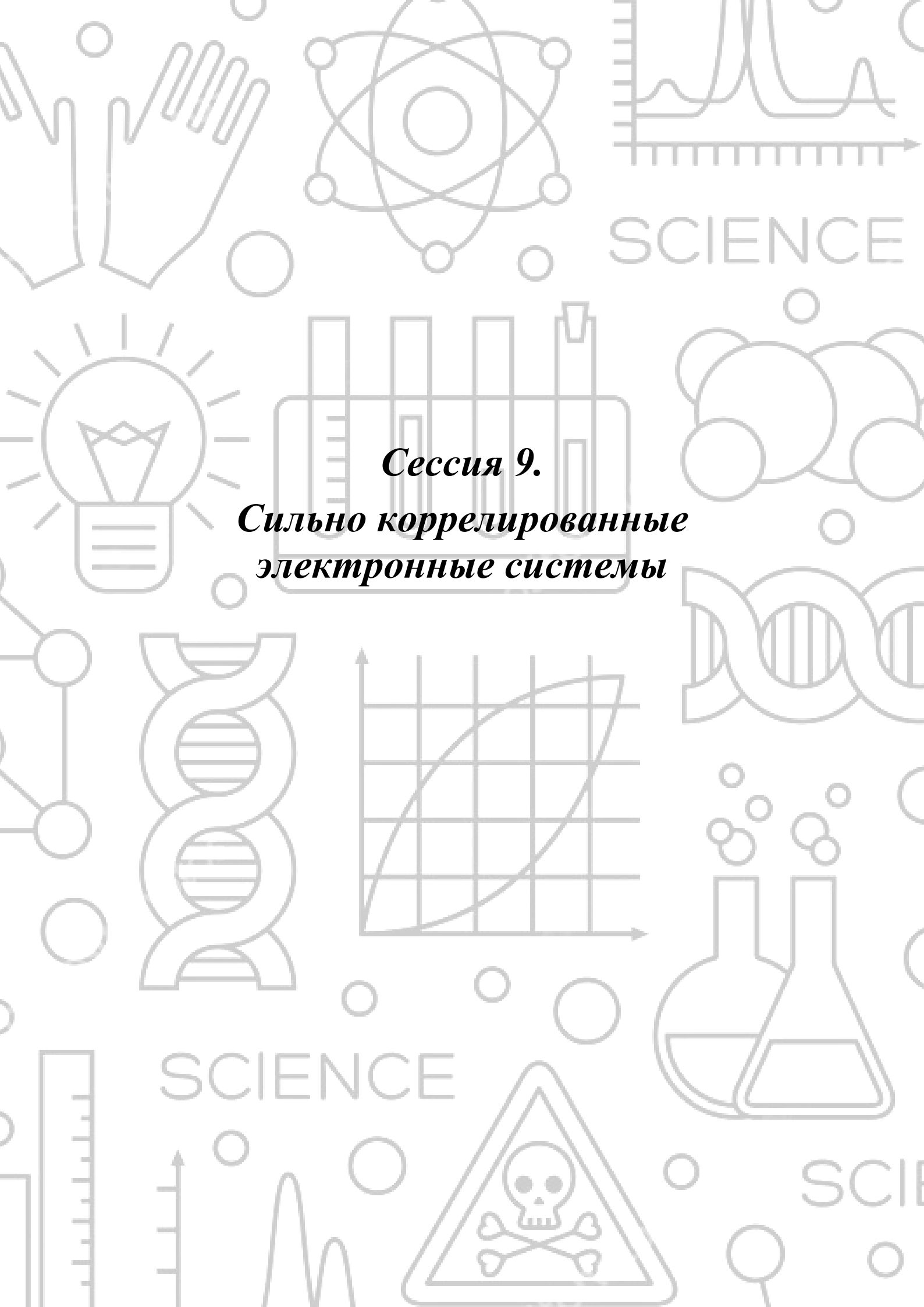


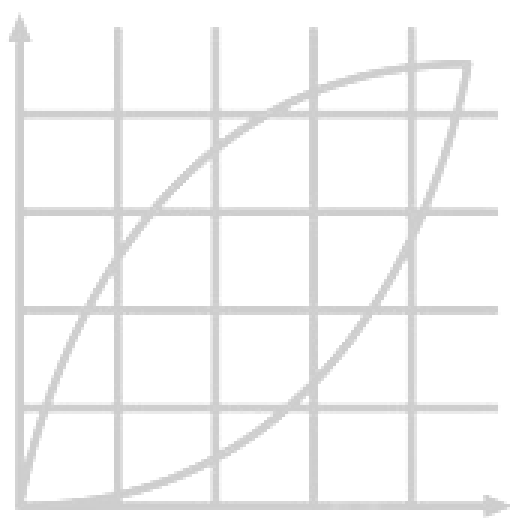
Рис.: Карты интенсивностей МУРН, полученных от образца соединения FeGe во внешнем магнитном поле $H = 0.2$ Тл при $T = 278,7$ К, т.е. выше T_C (а) и при $T = 277$ К т.е. ниже T_C (б).

1. Чубова Н.М., Москвин Е.В., Дядькин В.А., Дьюхарст Ч., Малеев С.В., Григорьев С.В., ЖЭТФ, том 152, вып. 5 (11), стр. 933–943. (2017)



SCIENCE

***Сессия 9.
Сильно коррелированные
электронные системы***



SCIENCE



SCIENCE

**Electronic, magnetic and phonon properties of B20-type compounds
Mn_{1-x}(Co,Rh)_xGe: *Ab initio* DFT study**

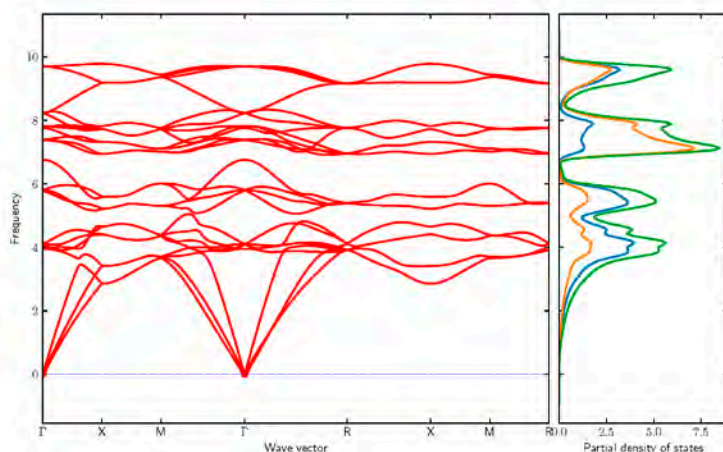
N. M. Chtchelkatchev^{1, 2, 3}, *M. V. Magnitskaya*^{1, 2}, *V. A. Sidorov*²,
*A. E. Petrova*², and *A. V. Tsvyashchenko*²

¹ Landau Institute for Theoretical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia

² Institute for High Pressure Physics of RAS, Troitsk, Moscow, Russia

³ Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

Some noncentrosymmetric B20-type compounds (high-pressure-synthesized MnGe among them) are known to exhibit spiral magnetic structures. Experimentally, Co/Rh substitution in MnGe, at relatively high doping level, induces magnetic structures with such long periods [1] — ten times larger than in pure MnGe — that they can be considered within an itinerant ferromagnet model. Here, we present a comparative DFT study of electron- and phonon-related properties in Mn_{1-x}(Co,Rh)_xGe (0 ≤ x ≤ 1) upon gradual replacement of Mn with 3d-Co and 4d-Rh ions. Our calculations are performed using the pseudopotential method as implemented in the Quantum Espresso package. We determine the evolution of electron and phonon spectra with increasing concentration x. This allows us to trace how the 3d–4d competition manifests itself in the structural, magnetic and transport properties of the compounds Mn_{1-x}(Co,Rh)_xGe. The effect of applied external pressure is also explored. The obtained results are compared with available experimental and theoretical data. The results for RhGe have been briefly published previously [2].



Phonon dispersions and density of states in MnGe.

This study was supported in part by RFBR (## 16-02-01122 and 17-02-00725) and Russian Academy of Sciences. N.M.C. and M.V.M. acknowledge support from Russian Science Foundation (grant RSF 18-12-00438) for theoretical calculations.

1. Martin, M. Deutsch, A.V. Tsvyashchenko et al. Phys. Rev. B 96, 020413R (2017).

2. M. Magnitskaya, N. Chtchelkatchev, A. Tsvyashchenko et al. J. Magn. Magn. Mater. Online 25 October 2017.

**Зонные возбуждения в соединениях с промежуточной валентностью:
сравнение результатов неупругого рассеяния нейтронов и *ab initio* теории***Е. А. Горемычкин**Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Соединения с промежуточной валентностью (ПВ), содержащие ионы редкоземельных элементов или актиноидов являются классическими системами для исследования сильных электронных корреляций. Эффективная масса электронов в этих системах в 10 - 50 раз превышает массу свободных электронов, что является результатом гибридизации локализованных f - электронов с электронами проводимости, и это взаимодействие является определяющим в формировании физических свойств соединений с ПВ. Недавно мы провели измерения методом неупругого рассеяния нейтронов четырехмерной функции закона рассеяния $S(\mathbf{Q}, \omega)$ на монокристаллическом образце соединения с ПВ CePd_3 на спектрометре прямой геометрии MERLIN (ISIS) и обнаружили, что интенсивность рассеяния является сильной функцией \mathbf{Q} и ω , что не согласуется с широко распространённым убеждением о локальной природе спиновых флуктуаций в соединениях с ПВ. Проведенные расчёты динамической восприимчивости методом DFT+DMFT показали очень хорошее количественное согласие с экспериментом без подгоночных параметров. Это первое количественное сравнение экспериментально измеренных зонных возбуждений с результатами расчётов из первых принципов во всей зоне Бриллюэна. Оно однозначно показало, что наблюдаемая \mathbf{Q} -зависимость обусловлена электрон-дырочными возбуждениями в гибридизованных $f-d$ зонах и которая усиливается при понижении температуры вследствие возрастания степени когерентности [1].

1. E.A. Goremychkin *et al.*, *Science* 359, 186 (2018)

**Анализ явления промежуточной валентности Eu и Sm
в соединениях SmB₆ и EuCu₂Si₂**

П. С. Савченко^{1, 2}, П. А. Алексеев^{1, 2}, Ж.-М. Миньо³, В. Н. Лазуков¹,
К. С. Немковский⁴, А. А. Подлесняк⁵

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

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

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

⁴ JCNS, Forschungszentrum Juelich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany

⁵ Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA

В работе проведён совокупный анализ экспериментальных данных по неупругому магнитному рассеянию нейтронов для промежуточновалентных систем на основе Sm (SmB₆, Sm(Y)S) и Eu (типа EuCu₂Si₂) с точки зрения применимости обобщенного подхода на основе теоретической модели экситона конечного радиуса.

Модель экситона конечного радиуса для квантовомеханически смешанного основного состояния, предложенная К.А. Кикоиным для описания свойств SmB₆, была развита и расширена для правильного понимания существенных деталей спектра неупругого магнитного рассеяния нейтронов в представленных системах. Основой нового подхода является представление о гибридизации, как о движущей силе формирования промежуточновалентно состояния для Eu.

В результате найдено объяснение для наблюдаемых экспериментально особенностей динамической магнитной восприимчивости EuCu₂Si₂, в частности: формирование в спектре так называемой резонансной моды; квадратичная перенормировка энергии резонансной моды в соединениях европия по отношению к энергии атомного межмультиплетного перехода при изменении валентности Eu; специфическая Q-зависимость магнитных факторов для f-электронных возбуждений.

Таким образом, впервые предложен и проанализирован дырочный аналог модели экситона конечного радиуса, позволяющий адекватно описать свойства ПВ состояния Eu, опираясь на единый (для Eu и Sm) подход к представлению структуры волновой функции основного состояния.

Работа поддержана грантом РФФ № 18-12-00133.

Исследование аномального отрицательного теплового расширения в системах $\text{Sm}_{0.80}\text{V}_6$ и $\text{Sm}_{1-x}\text{La}_x\text{V}_6$ ($x=0, 0.10, 0.22, 0.50$)

Д. А. Серебренников¹, Е. С. Клементьев¹, П. А. Алексеев^{2, 3}

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

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

³ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

Как правило, большинство твердых тел расширяются при нагревании. Тем не менее, на сегодняшний день известно большое количество систем, которые либо не меняют своих размеров в определенном температурном диапазоне (так называемые инвары), либо сжимаются при нагреве. При этом сжатие может происходить как анизотропно, так и изотропно. Физические механизмы, ответственные за отрицательное тепловое расширение в том или ином соединении, до сих пор являются предметом многочисленных научных дискуссий. Данные механизмы могут быть связаны как с колебательными модами, так и с электронными, магнитными или структурными степенями свободы. Более подробно с этим вопросом можно ознакомиться в детальных обзорах [1-3]. Нейтронные экспериментальные методики играют важную роль в выяснении механизмов формирования аномальных решеточных свойств и отрицательного теплового расширения в системах валентной нестабильностью.

Среди систем с отрицательным тепловым расширением, наибольшие по модулю значения демонстрируют соединения, в которых происходит перераспределение электронной плотности. К таковым системам относятся, в том числе, валентно-нестабильные соединения, для которых характерны зарядовые и спиновые флуктуации.

Данная работа посвящена изучению аномального отрицательного теплового расширения в валентно-нестабильных системах $\text{Sm}_{0.80}\text{V}_6$ и $\text{Sm}_{1-x}\text{La}_x\text{V}_6$ ($x=0, 0.10, 0.22, 0.50$). Представлены экспериментальные зависимости линейного коэффициента теплового расширения представленных систем, полученные дифракционными методами. Исследуются методы разделения парциальных вкладов в тепловое расширение. Температурные зависимости аномального отрицательного вклада анализируются при помощи феноменологических моделей Вейсса и Аптекаря-Понятовского.

Работа была поддержана грантом РФФИ 18-32-00583-мол-а.

1. Chen J., Hu L., Deng J., Xing X., Chem. Soc. Rev., 2015, v. 44, pp. 3522-3567

2. Sleight A.W., Inorg. Chem., 1998, v. 37, 2854-2860

3. Barrera G., Bruno J., Barron T., Allan N., J. Phys.: Condens. Matter, 2005, v. 17, R217-R252

Изучение сложных допированных оксидов кобальта нейтронным рассеянием и методами, базирующимися на синхротронном излучении

*В. В. Сиколенко¹, С. И. Тютюнников¹, В. В. Ефимов¹,
И. О. Троянчук², Д. В. Карпинский²*

¹ *Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Научно-практический центр по материаловедению НАН РБ, Минск, Беларусь*

В докладе представлены результаты исследований сложных оксидов кобальта, допированных Sr, Ca, Ba, Pr, Nd, Nb. Рассматриваются эффекты фазового расслоения, влияния допирования, дефицита по кислороду, внешнего давления и температуры на магнитные и структурные свойства кобальтитов. Обсуждаются возможные механизмы обменного взаимодействия и роль редких земель.

Работы выполнены на спектрометрах ИБР-2 и других европейских источниках нейтронов, а также на синхротронах Курчатовского института, ESRF и DESY.

Работы были поддержаны грантами ОИЯИ-БРФФИ Ф16Д-008 и Т16Д-009.

Особенности эволюции магнитного состояния $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$

И. А. Киселёв, В. А. Рыжов, В. В. Дериглазов.

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

В настоящее время допированные оксиды марганца, обладающие колоссальным магнитосопротивлением (КМС), такие как $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$, являются одними из наиболее перспективных материалов для технических приложений. В них наблюдаются сильные корреляции между зарядовыми, орбитальными, магнитными и решёточными степенями свободы, приводящие к богатой фазовой диаграмме. На спектрометре электронного магнитного резонанса широких линий (ЭМРШЛ) [1] нами был исследован монокристалл $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$. В этой системе наблюдаются переходы парамагнетик-ферромагнетик (ПФ) ($T_C \approx 186$ К) и изолятор-металл (ИМ) с $T_{\text{IM}} \approx 201$ К. В спектре ЭМРШЛ нами был выделен сигнал от поляронов малого радиуса, наблюдающихся выше температуры ПФ и ИМ переходов. В этом соединении перколяционный ИМ переход происходит за счёт роста количества ферромагнитных металлических кластеров, образующихся в парамагнитной матрице. В $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ поляроны появляются при температуре $T_{\text{pol}} \approx 234 - 239$ К (для разных использованных температурных режимов ЭМРШЛ), что близко к температуре однородной нуклеации феррокластеров $T^* \approx 240$ К [2]. Следует отметить, что зависимость g -фактора поляронного сигнала от температуры коррелирует с температурной зависимостью g -фактора сигнала от парамагнитной матрицы и резко отличается от таковой для феррокластеров. Это свидетельствует о связи между поляронами и парамагнитной матрицей в исследуемой системе. Решёточные поляроны малого радиуса были ранее обнаружены в $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0.21 \leq x \leq 0.45$) методом нейтронной дифракции [3]. В работе [4], при исследовании тонкой структуры поглощения рентгеновского излучения, было показано, что в $\text{La}_{0.79}\text{Ca}_{0.21}\text{MnO}_3$ поляроны образуются при $T \approx 240$ К, что совпадает с нашими данными ЭМРШЛ. Из данных по сопротивлению $R(T)$ $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ получено, что на зависимости $\ln(R/T)$ от $1/T$ наблюдается кроссовер при $T_{\text{cr}} \approx 233$ К близкой к T_{pol} . Все эти данные свидетельствуют о влиянии поляронов на ПФ и ИМ переходы, формирование гетерофазного магнитного состояния системы и КМС.

1. В.А. Рыжов, Е.И. Завацкий, В.А. Соловьёв, И.А. Киселев, В.Н. Фомичёв, В.А. Бикинцев, ЖТФ 65, в.1, 134-145 (1995).
2. V.A. Ryzhov, A.V. Lazuta, O.P. Smimov, V.P. Khavronin, P.L. Molkanov, Ya.M. Mukovskii and V.I. Chichkov, Solid State Phenomena Vols. 168-169, 485-488 (2011)
3. Pengcheng Dai, J.A. Fernandez-Baca, N. Wakabayashi, E.W. Plummer, Y. Tomioka, Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. 85, 2553 (2000).
4. F. Bridges, L. Downard, J. J. Neumeier, and T. A. Tyson, Phys. Rev. B 81, 184401 (2010).



Сессия 10.

***Приборы и методики нейтронного
эксперимента***

SCIENCE

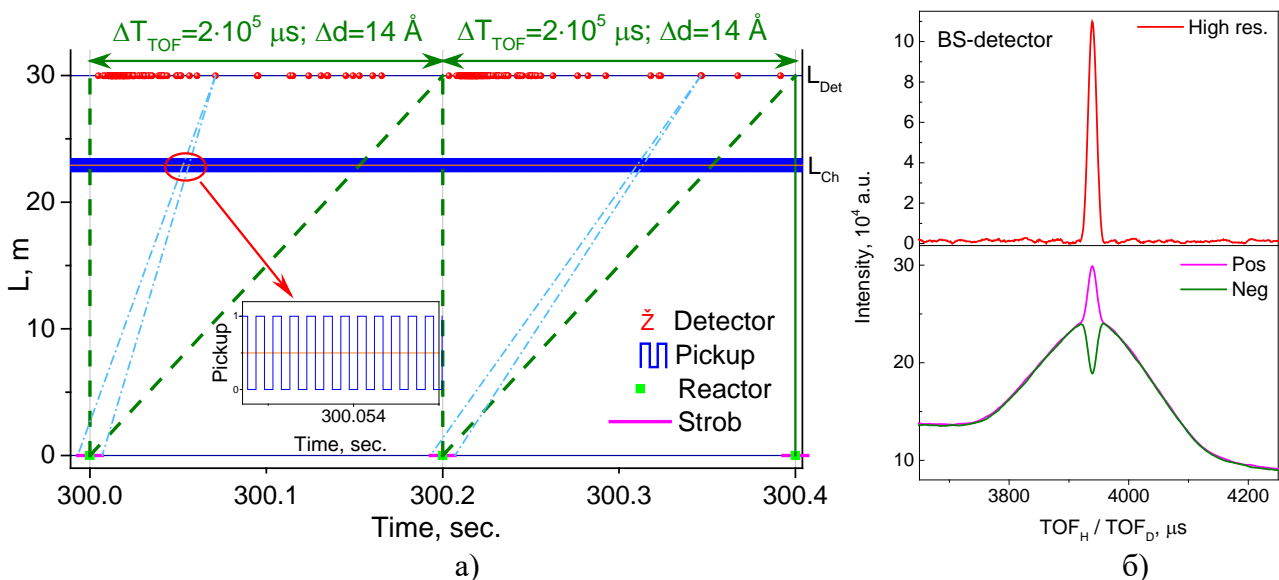
SCIENCE

Корреляционная фурье-дифрактометрия на импульсном источнике нейтронов: новые возможности при регистрации данных в list-mode

Г. Д. Бокучава

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

На фурье-дифрактометрах высокого разрешения на реакторе ИБР-2 внедрен новый метод регистрации экспериментальных данных в списочном режиме (list-mode). Разработанный новый блок накопления данных MPD на базе пяти ПЛИС ALTERA позволяет подключать до 240 детекторов и обеспечивать регистрацию всех событий в эксперименте (старты реактора, пикап-сигналы фурье-прерывателя, события детектора и т.д.). Накопленный с 2014 г. опыт работы на дифрактометре ФСД позволил разработать алгоритм для многодетекторных систем, позволяющий одновременно и достаточно быстро получать спектры высокого разрешения из "сырых" данных от всех подключенных детекторов с индивидуальными параметрами шкалы времени пролета. Это позволяет без проведения повторных измерений многократно восстанавливать корреляционные спектры высокого разрешения с оптимальными параметрами (шириной канала и стробирующего импульса, задержками, количеством каналов в спектре, сдвигом фазы прерывателя, формой пикап-сигнала и т.д.), вводить необходимые поправки, реализовать прецизионную фокусировку детекторов и осуществлять фильтрацию событий.



а) Участок временной диаграммы длительностью, соответствующей двум вспышкам импульсного реактора; интервал между вспышками 200000 мкс (= 0.2 сек.). Указаны реальные события, зарегистрированные в режиме list-mode: старты реактора, пикап-сигналы фурье-прерывателя и детекторные сигналы. б) Участок корреляционного спектра в окрестности дифракционного пика (211) от стандартного образца порошка железа α -Fe, восстановленный из «сырых» данных, зарегистрированных в режиме list-mode при макс. скорости фурье-прерывателя $\Omega_{max} = 4000$ об/мин. Внизу показаны «положительный» $\Gamma^+(t)$ и «отрицательный» $\Gamma^-(t)$ корреляционные спектры, разность которых представляет собой дифракционный спектр высокого разрешения: $H(t) = \Gamma^+(t) - \Gamma^-(t)$ (вверху).

**Стресс-дифрактометр с двойным монохроматором:
возможности и первые результаты**

И. Д. Карпов, В. Т. Эм, С. А. Рылов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Неразрушающий контроль напряжённо-деформированного состояния в массивных металлических деталях является важной задачей для многих отраслей промышленности. На сегодняшний день существует широкий набор применяемых для оценки внутренних напряжений методов, но главный недостаток большинства из них – использование разного рода допущений при расчётах из-за невозможности измерить все необходимые компоненты деформаций в 3-х взаимно перпендикулярных направлениях. Достоверность таких оценок может вызывать вопросы. Единственный неразрушающий метод, позволяющий напрямую проводить измерения всех компонент деформаций в толще объёмных кристаллических образцов и, соответственно, правильно рассчитывать внутренние напряжения – метод нейтронной дифракции. Однако, сложности с доступом к нейтронным центрам и дороговизна измерений не позволяют использовать его повсеместно.

При проектировании дифрактометра СТРЕСС на исследовательском реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» пришлось отказаться от традиционной компоновки стресс-дифрактометра в пользу схемы с двойным монохроматором из-за ограниченного пространства в реакторном зале. На этапе моделирования удалось добиться расчётной светосилы, сравнимой с установками на однокристалльном монохроматоре благодаря близкому расположению прибора к реактору. Эти расчёты обусловили целесообразность постройки дифрактометра. В результате всех проведённых работ в строй введён компактный, но в то же время светосильный прибор, который при мощности реактора ~ 6 МВт по разрешению и светосиле сравним с современными приборами на более мощных реакторах.

На дифрактометре СТРЕСС успешно проведены измерения распределения напряжений в сварных швах стальных пластин толщиной ~ 45 мм. В тонкостенных же (~ 3 мм) образцах из титанового и никелевого сплавов, полученных методом аддитивных технологий, его светосила позволила измерить напряжения с хорошим (~ 1мм³) пространственным разрешением. Полученные результаты приведены в докладе.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФ 16-12-10065.

Экспериментальная станция нейтронной радиографии и томографии на реакторе ИБР-2: текущее состояние, последние результаты и перспективы

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

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Несколько лет назад на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 была создана экспериментальная станция для проведения исследований с помощью метода нейтронной радиографии и томографии. Метод нейтронной радиографии заключается в получении нейтронных изображений исследуемых объектов за счет разной степени ослабления интенсивности нейтронного пучка при прохождении через материалы различного химического состава, плотности или толщины компонентов изучаемого образца.

Конструкция системы коллиматоров станции позволяет формировать нейтронный пучок с размерами до 20x20 см, с характеристическим параметром L/D от 200 до 2000. Для регистрации нейтронных изображений используется специально разработанный детекторный модуль с двух зеркальной схемой для уменьшения радиационного повреждения оптического модуля видеокамеры. Высокочувствительная камера на основе CCD матрицы Hamamatsu с разрешением 2048*2048 пикселей и конфокальным объективом обеспечивают возможность изменять оптическую область детектора от 20x20 см до 5x5 см в зависимости от требований эксперимента.

Параметры созданной установки позволяют успешно проводить научные эксперименты по анализу внутреннего строения технологических, инженерных, палеонтологических, астрофизических, геофизических и др. В качестве иллюстрации возможностей экспериментальной станции в докладе приводится обзор недавно полученных результатов: пространственное распределение компонентов и геометрическое расположение пор и пустот внутри цементных материалов, перспективных для строительства хранилищ радиоактивных отходов; распределение областей некогерентности в монокристалльных турбинных лопатках. Также приводятся результаты исследования объектов культурного наследия из фондов Института археологии РАН (Москва).

Одним из преимуществ импульсного характера работы реактора ИБР-2 является возможность реализации энергодисперсионной моды в экспериментах по нейтронной радиографии. В докладе представлены соответствующие результаты и перспективы.

Спин-эхо спектроскопия на очень холодных нейтронах*В. Т. Лебедев, И. М. Дубовский, А. П. Серебров**Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Создание светосильного источника ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-М НИЦ КИ – ПИЯФ для фундаментальной физики одновременно открывает возможности анализа динамики конденсированного состояния при низких энергиях возбуждений $\sim 10^{-12}$ - 10^{-9} эВ благодаря переходу к очень холодным нейтронам (ОХН, длины волн ~ 10 -30 нм).

Сопряженные таким энергиям времена затухания релаксационных мод для частиц (диффузия атомов, молекул) и коллективных движений (сегментальная динамика, конформационные переходы в полимерах) принадлежат микросекундному диапазону. Для используемых холодных нейтронов такой диапазон почти недоступен, однако он необходим, чтобы изучать динамику полимеров и биополимеров, молекулярных и атомных кластеров (фуллеренов, эндофуллеренов, нанотрубок, наноалмазов), процессы катализа и химических реакций.

Освоение диапазона ОХН требует не только высокого потока нейтронов, разработки широкополосных флипперов [1], широкоугольной нейтронной оптики, но и новой методологии. Традиционно методом спин-эхо определяют косинус-Фурье-образ частотной функции системы $S_{\text{even}}(t, \mathbf{q}) \sim \int S(\omega, \mathbf{q}) \cos(\omega t) dt$, что пригодно для систем с четной по частоте (переданной энергии) функцией $S(\omega, \mathbf{q})$, зависящей от переданного импульса \mathbf{q} . Однако кроме четной части $S_{\text{even}} = [S(\omega, \mathbf{q}) + S(-\omega, \mathbf{q})]/2$, функция рассеяния включает нечетную компоненту $S_{\text{odd}} = [S(\omega, \mathbf{q}) - S(-\omega, \mathbf{q})]/2$, которой тем более нельзя пренебречь при рассеянии очень холодного нейтрона, т.к. вероятен его «нагрев».

На примере полимеров и магнитных жидкостей показано, что четный и нечетный вклады в динамику сопоставимы в системах с демпфированными низкочастотными модами. Предложенный метод измерения спектров $S_{\text{odd}}(\mathbf{q}, t) \sim \int S(\omega, \mathbf{q}) \sin(\omega t) d\omega$ позволит выявить сильно затухающие возбуждения и найти отвечающие им потенциалы взаимодействий между частицами, т.е. отдельно характеризовать моды, маскируемые диффузией, описываемой четной Фурье-компонентой $S_{\text{even}}(t, \mathbf{q}) \sim \int S(\omega, \mathbf{q}) \cos(\omega t) dt$.

1. V. T. Lebedev, I. M. Dubovsky, Gy. Török, A. P. Serebrov, J. of Surf. Investig.: X-ray, Synchr. and Neutron Techn., 12, 3, 426 (2018), Pleiades Publishing, Ltd.

Первые эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов на установке «ГОРИЗОНТ» на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН

В. С. Литвин, Р. А. Садыков, Д. Н. Трунов, С. И. Поташев

Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, 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]. Вертикальная плоскость рассеяния позволяет исследовать жидкие образцы, например, пленки на поверхности жидкости. Также установка может использоваться для малоугловых экспериментов. Для этих целей проведено дооснащение двухкоординатным монитором и двухкоординатным детектором нейтронов, изготовленными в 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 каналу. 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 [3] и, как следствие, увеличение интенсивности МУРН.

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)
2. А. В. Белушкин, А. А. Богдзель, В. В. Журавлев и др., *ФТТ*, 52, №5, стр.961-963 (2010)
3. В. А. Петров, Л. И. Вершинина, В. Ф. Суховаров, Р.Д. Стократов, *ФММ*, 57, стр. 127-130 (1984)

Нейтронный дифрактометр высокого давления ДН-6 для исследования микрообразцов в экстремальных условиях: последние результаты

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

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Применение высокого давления является хорошо известным прямым методом воздействия на структуру и физические свойства соединений. Методы дифракции дают уникальную возможность наблюдать изменения в структуре в масштабе сравнимым с размерами атомов. Среди большого разнообразия дифракционных методов метод нейтронной дифракции дополнительно позволяет исследовать кристаллическую структуру соединений, содержащих легкие атомы, такие как водород и кислород, и особенно, дает возможность исследовать магнитную структуру. Однако эволюция методов нейтронной дифракции при высоком давлении серьезно ограничена крайне малой интенсивностью нейтронных источников (на много порядков) по сравнению с источниками синхротронного излучения.

Дифрактометр ДН-6, расположенный на реакторе ИБР-2, специально разработан для исследования магнитной и кристаллической структуры материалов в экстремальных условиях в том числе и с использованием ячеек с алмазными наковальнями. Высокая плотность потока нейтронов, достигающая значения

$3 \cdot 10^7$ н⁰/см²с на образце благодаря установленному в 2017 году параболическому фокусирующему нейтронному каналу, равно как и широкий телесный угол детекторной системы, состоящий из 192 независимых гелиевых счетчиков, позволяют исследовать образцы объемом 0,01-0,02 мм³ и даже меньше. Использование рефрижератора замкнутого цикла позволяет проводить эксперименты с алмазными ячейками в широком диапазоне температур 4-300 К. Представлены примеры недавних исследований при давлениях до 40 ГПа. Обсуждаются перспективы дальнейшего развития дифракции нейтронов при высоком давлении на реакторе ИБР-2.

Ансамбль нейтронных рефлектометров для реактора ПИК

Н. К. Плешанов, В. А. Матвеев, В. Г. Сыромятников, В. В. Тарнавич

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

В настоящее время нейтронная рефлектометрия является мощным методом исследования поверхностей, тонких плёнок и многослойных структур. Она используется для детальных исследований физических и химических процессов на границах, био-процессов с взаимодействием и переносом веществ через границы, мембраны и т.д.

Коэффициенты зеркального отражения нейтронов используются для восстановления глубинных профилей плотностей длин рассеяния (SLD) которые несут информацию о химическом (и изотопном) составе отражающих слоев, для послойной векторной магнитометрии. При использовании позиционно-чувствительного детектора (ПЧД) наряду со съемкой зеркального отражения производится измерение незеркального рассеяния; щелевая геометрия съемок при малых углах скольжения позволяет разрешать структурные и магнитные неоднородности (вариации SLD в плоскости зеркального отражения) масштабов $0.1 \div 10$ мкн. Коллимируя падающий пучок в горизонтальной и вертикальной плоскостях, также снимают малоугловое рассеяние при скользящем падении (GISANS) на латеральных неоднородностях (на вариациях SLD в плоскости, перпендикулярной плоскости зеркального отражения). Таким образом можно разрешать структурные и магнитные неоднородности масштабов $1 \div 10^2$ нм.

Ансамбль специализированных, дополняющих друг друга нейтронных рефлектометров будет построен на реакторе ПИК:

- рефлектометр высокого разрешения NERO с вертикальным образцом для изучения твердотельных тонких пленок и слоистых, немагнитных и магнитных, латерально профилированных структур;
- высокопоточный рефлектометр SONATA с вертикальным образцом и низким/умеренным разрешением для изучения образцов с малой площадью поверхности с тонкими и атомарно тонкими пленками; слоистых и латерально профилированных структур, гранул и атомных агломератов на поверхности и в слоях; магнетизма в подобных структурах и процессов на границах между твердыми фазами, твердыми и жидкими фазами, а также в приграничных областях с секундной и более медленной кинетикой;
- рефлектометр LIRA с горизонтальным образцом и варьируемым разрешением для экспериментов с поверхностями и границами жидкостей, с границами между жидкими фазами, жидкими и твердыми фазами, для исследования как структурных, так и магнитных аспектов.

Работа поддержана Федеральной целевой программой Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № RFMEFI60717X0194).

Исследование спектра эпитепловых нейтронов от компактного источника с помощью детекторов на основе гелия-3 и бор-10

*С. И. Поташев, Ю. М. Бурмистров, С. В. Зуев, С. Х. Караевский,
Е. С. Конобеевский, В. Н. Марин, В. Н. Пономарев, Г. В. Солодухов*

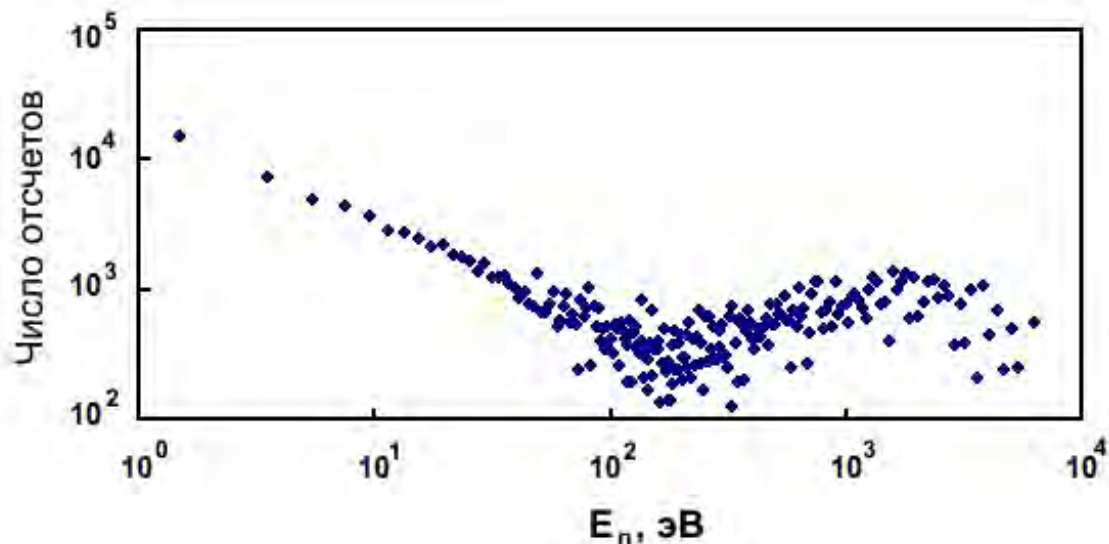
Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия

Рассмотрена возможность измерения спектров нейтронов из фотонейтронного источника нейтронов на базе линейного ускорителя электронов. Нейтроны генерируются в бериллиевой мишени под действием тормозных гамма-квантов. Для частичного замедления нейтронов используется куб из полиэтилена размерами $10 \times 10 \times 10 \text{ см}^3$. Энергия нейтронов измеряется по времени пролета детекторами на основе ^{10}B [1] и ^3He , установленными на дистанциях около 7 и 8 м соответственно.

Эксперименты выполнялись при энергиях электронов от 5 до 8 МэВ. Исследуемый диапазон энергий зарегистрированных нейтронов составил от 1 эВ до нескольких десятков кэВ. Было обнаружено, что верхняя граница энергии и выход нейтронов максимальны для энергий 7 и 8 МэВ.

Для более тонкого выделения диапазона энергий разработан модуль цифровых электронных ворот, который служит мастером для запуска регистрации события в детекторе нейтронов. Это позволяет снизить фоновую загрузку и регистрировать нейтроны в заданном диапазоне энергий.

На рисунке представлен спектр энергии нейтронов с энергиями более 1 эВ, измеренный по методу времени пролета с помощью гелий-3 счетчика.



Спектр энергии нейтронов, измеренный по методу времени пролета

1. S. Potashev, Yu. Burmistrov, et al., IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 798 (2017) 012160.

Создание спектрометра спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов с применением линейно растущего магнитного поля на реакторе ИБР-2

*В. И. Боднарчук¹, В. В. Садилов^{1, 2}, С. А. Маношин¹, А. С. Дорошкевич¹,
А. В. Нагорный^{1, 3}, А. И. Иоффе⁴, М. В. Авдеев¹*

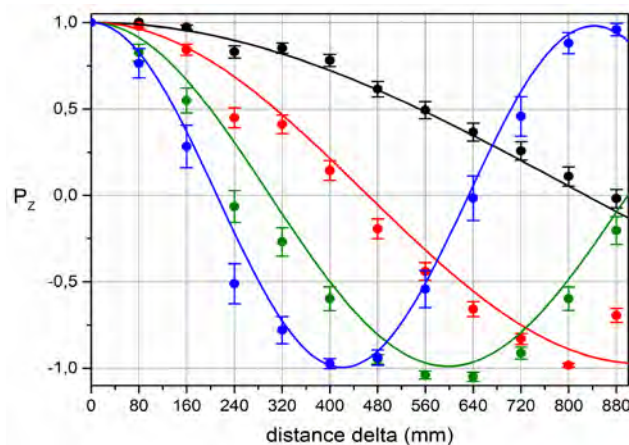
¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

³ Киевский национальный Университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

⁴ Юлихский исследовательский центр, Юлих, Германия

В работе рассматривается метод спинового эха для регистрации малоуглового рассеяния нейтронов (СЭМУРН), в основе которого лежит использование пилообразных импульсов магнитного поля в спиновых ротаторах, кодирующих скорость нейтронов фазой ларморовской прецессии спина нейтрона [1]. Импульсный характер магнитных полей делает выгодным использование данного метода на импульсных источниках нейтронов, позволяя задействовать нейтроны в широком диапазоне длин волн. Кроме этого, ключевой параметр метода - спин-эхо длина Z обратно пропорциональна кубу длины волны $Z(\lambda) \sim \lambda^{-3}$ в отличие от традиционных СЭМУРН методов с постоянным или радиочастотным магнитными полями, где спин-эхо длина обратно пропорциональна квадрату длины волны. Это позволяет в перспективе достигать значительно больших значений Z при одних и тех же длинах волн нейтронов. В настоящее время СЭМУРН установка с использованием пилообразных импульсов магнитного поля реализуется на 9-ом канале реактора ИБР-2 в Дубне. В работе изучаются особенности работы такого спектрометра методом Монте-Карло моделирования в программном пакете VITESS [2]. А также представлены первые результаты эксперимента по измерению спин-эхо фокусировки и сравниваются полученные данные с модельным экспериментом, выполненным в программном пакете VITESS.



Спин-эхо фокусировка полученная на прототипе СЭМУРН установки и в программном пакете VITESS

1. Ioffe, A. Nuclear instruments & methods in physics research, 2011. A 634, pp 55-58.

2. URL: www.helmholtz-berlin.de/forschung/oe/em/transport-phenomena/neutronmethods/vitess/index_en.html

Устройства высокого давления для нейтронографии*Р. А. Садыков**Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия**Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия**Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

В докладе представлены пресса и камеры высокого давления для нейтронографических измерений как «in situ» [1] так и камеры фиксированного высокого давления (clamp HPCC) [3] (краткий обзор наших и зарубежных устройств). Магнитные и немагнитные камеры имеют несколько различные конфигурации и сочетания материалов в зависимости от типа нейтронных исследований монокристаллов и порошковых образцов: дифракция, неупругое рассеяние и малоугловое рассеяние. Повышенный интерес к квантовым критическим явлениям, квантовой фрустрации и состоянию не ферми жидкостного поведения ряда магнетиков под давлением, вызвал необходимость проведения прямых нейтронографических экспериментов как при низких температурах и в сильных магнитных полях, так и при высоком давлении одновременно. Разработанные и использованные камеры фиксированного давления (clamp HPCC) имеют конструкцию, позволяющую помещать их в существующие различные нейтронографические криостаты, включая криостат растворения и криомагниты и использовались на разных нейтронографических установках нейтронных центров: SINQ (Switzerland), ISIS (UK), HMI (Germany), ILL (France) и SNS (USA) [2,3]. Исследования проводились вплоть до 40 кбар, $T = 100$ мк и $H = 9.5$ Т с использованием камер, изготовленных из немагнитных сплавов 40ХНЮ (NiCrAl), TiZr (нулевая матрица) и твердых Al-сплавов (В95Т, В96Т) [3] и закаленной стали 45ХМНФА [1, 3].

1. High pressure apparatus for neutron diffraction investigation of the strongly compressibly substances (H_2 , D_2 , Ar). Sadykov R.A., Gruzin P.L., Suhoparov V.A. High Pressure Research, 1995, Vol.14, pp 199-202.
2. Pressure effect on hydrogen tunneling and vibrational spectrum in α -Mn. A.I. Kolesnikov, A. Podlesnyak, R. A. Sadykov at all. PHYSICAL REVIEW B 94, 134301 (2016)
3. High pressure cells for study of condensed matter by diffraction and inelastic neutron scattering at low temperatures and in strong magnetic fields. R A Sadykov, Th. Strassle, A Podlesnyak, L Keller, B Fak, J Mesot. IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 941 (2017) 012082.

Установка для комплексной радиационной диагностики ДРАКОН

*В. П. Глазков¹, Р. А. Садыков², В. Т. Эм¹, Д. Н. Трунов^{1,2}, А. И. Гуреев¹,
С. Н. Аксенов^{1,2}, М. М. Мурашев¹, Л. В. Кравчук²*

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

² *Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия*

Многоцелевая нейтронографическая установка ДРАКОН расположена на выведенных пучках тепловых нейтронов на реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» и служит для неразрушающего исследования больших (до 100 кг) и малых объектов. За счет особой конструкции стола образца возможно также проведение дифракционных экспериментов.

Установка состоит из 3х различных по своему назначению каналов. Первый канал — это прямой пучок от реактора ИР-8. Второй канал — это канал с изменяемой энергией нейтронов от 1.6 до 6 Å. Третий канал является косым канал, на котором можно проводить как измерения на гамма пучке (от облучения медной пластины нейтронами) и холодными нейтронами с прямого пучка с энергией около 0,9 Å.

Для изменения длинны волны и работы с косым каналом используется 10-осевой двух-кристальный монохроматор. Высокая точность перемещения позволяет добиться точного позиционирования пучка нейтронов на образце.

За перемещение образца и оборудования вдоль пучков отвечает специально разработанный многофункциональный 8-осевой стол образца. Использование обратной связь двигателей и датчиков положения угла позволило добиться высокой точности перемещения достаточной для дифракционных измерений.

Для регистрации нейтронов используется разные типы детекторов в зависимости от требуемой задачи (Image plate, CCD, сцинтилляционные детекторы).

Использование широкого диапазона энергии нейтронов и гамма-излучение, а также различного типа детекторов с высокоточной системой перемещения позволяет решать широкий круг задач, начиная с томографии больших и малых (в том числе биологических объектов) и заканчивая дифракцией.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом РФФИ №16-12-10065.

Инструментальная линия двухкристального спектрометра с учетом зависимости коэффициента поглощения от длины волны

Й. Шмайсер, А. Н. Тюлюсов

*Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

Одним из интерференционных явлений при рассеянии нейтронов на совершенных поглощающих кристаллах является эффект «аномального пропускания», аналог эффекта Борманна в рентгеновской кристаллооптике. Для изучения этого эффекта, а также в широком ряду других экспериментов по нейтронной оптике и ультрамалоугловому рассеянию нейтронов применяется схема двухкристального спектрометра. Известно выражение для инструментальной линии двухкристального спектрометра в предположении о слабой зависимости сечения поглощения нейтронов от длины волны [1], однако при динамической дифракции нейтронов с длиной волны, лежащей вблизи резонанса поглощения ядер кристалла такое утверждение уже будет неверно.

Получено аналитическое выражение для инструментальной линии двухкристального спектрометра, не требующее ограничения на характер зависимости сечения поглощения от длины волны. Рассчитаны модельные инструментальные линии для спектрометрических схем Брэгг-Брэгг, Брэгг-Лауэ, Лауэ-Брэгг, Лауэ-Лауэ на примере слабопоглощающего кристалла Ge в области слабой зависимости сечения от длины волны и для InSb в области длин волн, близких к резонансу поглощения.

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



Сессия 11.

***Функциональные материалы,
материаловедение и прикладные
исследования (энергетика,
окружающая среда, геофизика,
культурное наследие)***

Мониторинг и изучение структуры планарных и объемных электрохимических границ раздела для литиевых источников питания методами рассеяния нейтронов

М.В. Авдеев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Эксплуатационные характеристики электрохимических источников питания и накопителей энергии в значительной степени определяются процессами, возникающими на границах раздела. Высокая проникающая способность нейтронного излучения позволяет изучать скрытые электрохимические границы раздела в сложных системах, наиболее приближенных по структуре к электродам в реальных источниках, методами рассеяния тепловых нейтронов, таких как нейтронная рефлектометрия и малоугловое рассеяние нейтронов [1,2]. В докладе представлены примеры применения данных методов к планарным и объемным электрохимическим границам раздела для литиевых источников питания с особым акцентом на возможности вариации контраста при использовании изотопного замещения водород-дейтерий в жидких электролитах.

Так, литий-ионные аккумуляторы с жидкими электролитами характеризуются появлением на поверхности электрода специфического слоя, известного как фаза твердого электролита (SEI). Структурные свойства данного слоя (толщина ~ 10 нм) определяют стабильность и эффективность использования электродного материала. Также они важны для возможного появления и роста поверхностных неоднородностей, которые влияют на долговечность и безопасность аккумуляторов. С помощью нейтронной рефлектометрии отслеживается и анализируется эволюция роста такого слоя и последующего осаждения лития в зависимости от состава электролита.

Для другого актуального класса источников, литий-кислородных аккумуляторов на основе пористых углеродных матриц, важным аспектом, определяющим их емкость, является образование при разрядке пассивирующего слоя из продукта основной реакции (преимущественно пероксид лития) на поверхности смоченного жидким электролитом углерода с последующим «запиранием» пор, препятствующим диффузии кислорода. С помощью малоуглового рассеяния нейтронов исследуется рост и степень заполнения пор побочным продуктом на различных глубинах разрядки, при различной интенсивности разрядки и при использовании разных жидких электролитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 17-12-01540.

1. D.M. Itkis, J.J. Velasco-Velez, A. Knop-Gericke, A. Vyalikh, M.V. Avdeev and L.V. Yashina, *ChemElectroChem*, 2015, 2, 1427.
2. M.V. Avdeev, A.A. Rulev, V.I. Bodnarchuk, et al., *Appl. Surf. Sci.*, 2017, 424, 378.

Интерметаллические соединения на основе железа с гигантской магнитострикцией

И. С. Головин¹, А. М. Балагуров^{2, 3}

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

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

Представлены результаты кооперации МИСиС и ОИЯИ в исследованиях структуры, фазовых переходов, микроструктуры и функциональных свойств интерметаллидов на основе железа. Эксперименты были проведены на нескольких бинарных (Fe-Al, Fe-Ge, Fe-Mn) и тройных (Fe-Al-Cr, Fe-Ga-Al) системах, но в основном касались сплавов Fe-Ga и Fe-Ga-Tb, обладающих несколькими важными функциональными свойствами, включая рекордные магнитострикцию и внутреннее трение. Структура и микроструктура сплавов изучались на нейтронном дифрактометре ФДВР (реактор ИБР-2) в модах высокого разрешения ($\Delta d/d \approx 0.0015$) и высокой светосилы ($\Delta d/d \approx 0.015$). Нейтронограммы, измеренные с высоким разрешением, использовались затем для анализа профилей дифракционных пиков, во второй моде необходимая статистика набиралась за время ~ 1 минуты, и она применялась для непрерывного сканирования по температуре при скорости ее изменения около 2 К/мин. Это сочетание позволило выявить большое число неизвестных ранее особенностей протекания фазовых переходов в Fe-сплавах и организации их микроструктуры и проследить корреляцию структуры с функциональными свойствами. Их примерами являются смена последовательности фазовых переходов в сплаве Fe-Ga при его допировании тербием, формирование неупорядоченных структур при переходе между упорядоченными фазами, обнаружение мезоскопических кластеров с упорядоченной атомной структурой, дисперсно внедренных в неупорядоченную матрицу. Результаты исследований опубликованы в серии статей (всего 16), основными из которых являются [1-6], включая монографию [7].

Авторы благодарны основным соавторам И. А. Бобрикову и С. В. Сумникову (ОИЯИ) и В. В. Палачевой (МИСиС) за огромный вклад в эту работу и РФФИ за финансовую поддержку (проекты 17-52-44024, 18-02-00325, 18-58-52007 и 18-58-53032).

1. I. S. Golovin, A. M. Balagurov, V. V. Palacheva et al. *Materials and Design* 98, 113-119 (2016).
2. А. М. Балагуров, И. А. Бобриков, И. С. Головин и др. *Письма в ЖЭТФ* 104, 560-567 (2016).
3. А. М. Балагуров, I. S. Golovin, I. A. Bobrikov et al. *J. Appl. Cryst.* 50, 198-210 (2017).
4. I. S. Golovin, A. M. Balagurov, V. V. Palacheva et al., *J. of Alloys and Compounds* 707, 51-56 (2017).
5. V. V. Palacheva, I. S. Golovin, A. M. Balagurov et al., *Acta Mater.* 130, 229-239 (2017).
6. А. М. Балагуров, I. A. Bobrikov, I. S. Golovin et al., *Acta Mater.* 153, 45-52 (2018).
7. I. S. Golovin, A. M. Balagurov “**Structure Induced Anelasticity in Iron Intermetallic Compounds and Alloys**” *MRF*, v. 30 (2018) 247 pages.

Нейтронные исследования композитов из сплава Fe-Ni с фуллереном C₆₀

*П. А. Борисова¹, М. С. Блантер², В. В. Бражкин³,
В. П. Филоненко³, М. М. Мурашев, Е. О. Седых¹*

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

² *МИРЭА - Российский технологический университет, Москва, Россия*

³ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

Проведены исследования спеченных порошковых смесей сплава Fe-33,2 масс.% Ni с аморфной фазой фуллерена C₆₀ (1.7 ат.%). Перемешивание порошков проводили в активаторе (WC) мельницы Fritsch в инертной атмосфере (He). После обработки в мельнице сплав сохранял ГЦК кристаллическую структуру. Спекание компонентов проводили при давлении 2-8 ГПа и температурах до 950°C. Образцы в форме таблетки диаметром 5 мм и толщиной 1 мм исследовали при комнатной температуре и нормальном давлении.

Нейтронные исследования проводили на станциях нейтронной дифракции «ДИСК» (длина волны $\lambda=1.675 \text{ \AA}$) и томографических исследований «ДРАКОН» (длина волны $\lambda=2 \text{ \AA}$, время экспозиции 180 с) в нейтронном исследовательском комплексе на базе реактора ИР-8, НИЦ «Курчатовский институт».

После спекания (2 ГПа и 950°C, 4.5 ГПа и 900°C, 8 ГПа и 800°C) металлическая матрица сохранила свою ГЦК структуру. Фуллереновая добавка в композите либо пошла на образование карбидов (при 4.5 и 8 ГПа), либо образовала скопления углеродной компоненты (при 2 ГПа). Максимальный размер скоплений углеродной компоненты составлял $\sim 1 \text{ мкм}$. Скопления углеродной компоненты имели относительно низкую микротвердость. Повышение давления спекания (4.5 и 8 ГПа) привело к диспергированию углеродной компоненты, повысило ее микротвердость и сделало ее тверже металлической компоненты. Анализ результатов проведен с учетом превращений аморфной фазы фуллерена C₆₀ при высоких температурах и высоких давлениях [1] и структуры подобного композита с высокой концентрацией добавки фуллерена [2].

Работа выполнена с использованием уникального научного оборудования «НИК на базе реактора ИР-8». Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00262 мол_а (нейтронная дифракция, томография композитов Fe-Ni-C, обработка и обсуждение результатов). В. В. Бражкин (эксперименты с аморфной фазой фуллеренов при высоких давлениях; обсуждение результатов) благодарит РНФ (проект № 14-22-00093) за финансовую поддержку настоящего исследования.

1. P.A.Borisova, M.S.Blanter, et al., J. of Phys. and Chem. of Solids 83, 104 (2015).

2. P.A. Borisova, M.S.Blanter, et al., J. of Alloys and Compounds 656, 383 (2016).

Аналог сверхпроводимости 1.5 рода в наноструктурированном олове

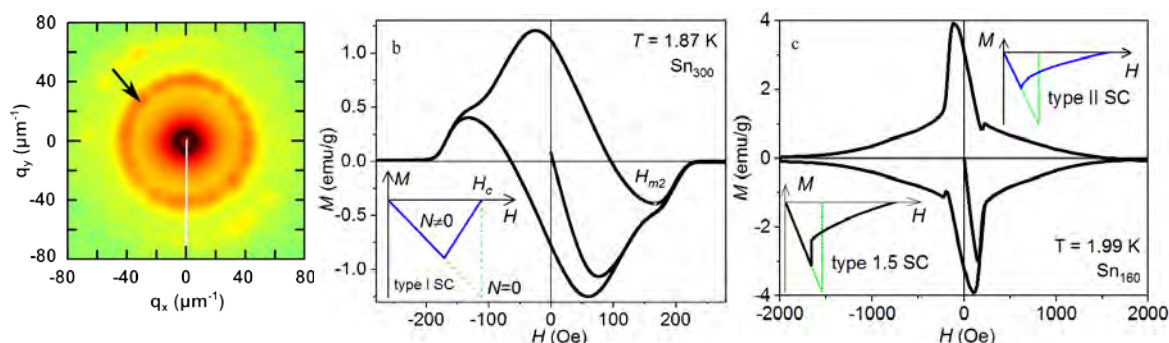
*А. А. Быков¹, Д. М. Гохфельд², С. И. Попков², А. А. Мустонов^{1, 3},
Н. А. Григорьева³, А. Zakhidov, S. V. Grigoriev^{1, 3}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина, Россия*

² *Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

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

Магнитное поле проникает в сверхпроводник 2 рода при $H > H_{c1}$ в виде тонких нитей, вихрей Абрикосова, несущих квант магнитного потока. В отличие от сверхпроводников 1 рода, в сверхпроводниках 2 рода вихри испытывают отталкивание друг от друга и от поверхности образца. Однако, в некоторых системах [1, 2] может реализоваться сосуществование отталкивания и притяжения вихрей. Условием для возникновения такой сверхпроводимости полуторного рода является близость параметра Гинзбурга-Ландау $\kappa = \lambda_L/\xi$ к величине $1/\sqrt{2}$, разделяющей сверхпроводимость 1 и 2 рода [3].



Карта МУРН для Sn₁₆₀, стрелкой показано дифракционное кольцо (слева). Полевые зависимости намагниченности (справа). На вставках схемы равновесных намагниченностей сверхпроводников различных типов.

В настоящей работе синтезированы периодические оловянные структуры, полученные заполнением пор в кремниевом опале с размерами структуры большими, чем в работе [4]. Структуры аттестованы методами малоугловой дифракции. Полевые зависимости намагниченности показывают изменение типа сверхпроводимости при уменьшении характерного размера структурных элементов. Определены критические токи и построена зависимости силы пиннинга от магнитного поля.

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

1. E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B 72, 180502 (2005)
2. V. Moshchalkov, M. Menghini, T. Nishio, Q. H. Chen, A. V. Silhanek, V. H. Dao, L. F. Chibotaru, N. D. Zhigadlo, and J. Karpinski, Phys. Rev. Lett. 102, 117001 (2009)
3. E.H. Brandt, M.P. Das, J. Supercond. Nov. Magn. 24, 57–67 (2011).
4. Ciou, Y.S., Lee, M.K., Charnaya, E. V, Tien, C., Chang, L.J., Kumzerov, Y. a, Samoylovich, M.I.: Supercond. Sci. Technol. 26, 55009 (2013).

СЕССИЯ 11. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ (ЭНЕРГЕТИКА, ОКРУЖАЮЩАЯ СРЕДА, ГЕОФИЗИКА, КУЛЬТУРНОЕ НАСЛЕДИЕ)

Управление структурой цементных композиций на наноуровне по данным малоуглового рассеяния нейтронов

А. М. Гурьянов

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Прочность и долговечность цементосодержащих строительных материалов определяется как составом исходного клинкера, так и структурой гидратированных портландцементных композиций на микро- и наноуровне. В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов определялись структурные параметры наночастиц силикат-гидрата кальция (C-S-H), образующихся при гидратации портландцемента: распределение наночастиц по размерам, их средний радиус, фрактальная размерность. Введение модифицирующих нанодобавок в гидратированные портландцементные композиции влияет на структурные параметры как самих наночастиц C-S-H, так и образуемого ими гелеобразного каркаса цементного камня.

Были исследованы гидратированные портландцементные композиции на основе бездобавочного портландцемента марки Д0-500. Использовались комплексные нанодобавки, в составе которых присутствовали компоненты, выполняющие роль наполнителя, химически активные компоненты, играющие роль модификатора, а также поверхностно-активные вещества. В качестве первых использовались альфа оксид алюминия, гамма оксид алюминия, карбонатный шлам, углеродные наноматериалы. В качестве вторых использовались алюмощелочной и алюмокальцевый шламы, имеющие техногенное происхождение.

Измерение интенсивностей МУРН образцами проводилось спустя одни сутки, семь, четырнадцать и двадцать восемь дней после затворения портландцемента. По графикам интенсивностей нейтронного рассеяния определялись средние радиусы рассеивающих объектов, их фрактальные размерности, дифференциальные сечения рассеяния и функции распределения по расстояниям рассеивающих объектов [1-3].

Установлено, что применение комплексных нанодобавок позволяет направленно управлять процессом формирования структуры наночастиц C-S-H, повышать прочность контактных зон частиц в цементной матрице, что, в конечном итоге, влияет на долговечность цементосодержащих строительных материалов.

1. A. M. Guryanov, Proc. Engin. 111, 283 (2015).
2. A. M. Guryanov, Proc. Engin. 153, 217 (2016).
3. A. Guryanov, S. Korenkova, Yu. Sidorenko, MATEC Web of Conf. 86, 04011 (2016).

Нейтроннографические исследования адсорбционного фазового перехода в иттрий-стабилизированных нанопорошках ZrO_2

*А. С. Дорошкевич^{1, 2}, Э. Б. Аскеров^{1, 3}, А. Х. Исламов¹, А. В. Шило²,
А. И. Логунов⁴, Т. Ю. Зеленьяк⁴, В. Р. Гашимова⁴, А. И. Мададзада^{1, 3},
А. А. Логинов⁴, В. С. Дорошкевич⁵, V. Almasan⁶, D. Lazar⁶, В. А. Турченко^{1, 2},
В. И. Боднарчук¹, Ю. Ю. Бачериков⁸, Р. Г. Назмитдинов^{1, 4}, Х. Т. Холмуродов^{1, 4}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАНУ, Киев, Украина

³ National Nuclear Research Center CJSC, Baku, Azerbaijan

⁴ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

⁵ Донецкий национальный университет, Донецк, Украина

⁶ National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies, Cluj-Napoca, România

⁷ Институт физикзд9лги полупроводников им. В. Е. Лошкарева НАНУ, Киев, Украина

Исследование наноструктурированных систем дифракционными методами осложнено большой рассеивающей способностью как самих наноразмерных кристаллов, так и множественных дефектов, локализованных на их поверхности. Дифрактограммы от наноструктурированных объектов содержат большой уровень некогерентного фона и низкую интенсивность рефлексов. Поэтому, основанные на анализе формы дифракционного пика дифракционные методы зачастую не позволяют получить важную информацию не только о микроструктуре, но иногда – даже о фазовом составе исследуемых наноматериалов. Особенно заметны ограничения применимости дифракционных методов к исследованию наноструктурированных объектов в случае использования рентгеновских лучей. Во-первых, глубина проникновения последних в образец ограничивается поверхностным слоем порядка 20мкм, и лишь малая часть отражающих объектов дает свой вклад в интенсивность структурных рефлексов. Во-вторых, в случае монохроматического пучка функция разрешения $R(Q)$ имеет глубокий минимум, что приводит к существенному ухудшению разрешения в области малых Q углов и накладывает серьезные ограничения на достигаемую точность [1].

Тем не менее, исследования наноструктурированных объектов возможны с использованием нейтронного излучения и соответствующих принципов получения и обработки данных. Характеристическая длина проникновения нейтронного пучка в материал составляет несколько сантиметров, поэтому, поэтому, существенно (минимум в 6 раз для кубической решетки) возрастает интенсивность дифракции. В отличие от характеристического рентгеновского излучения энергетический спектр медленных нейтронов имеет непрерывный (максвелловский) характер. Скорость медленных нейтронов достаточно мала и позволяет проводить анализ энергии нейтрона по времени пролета (TOF-метод).

Тетрагонально – моноклинный переход в нанопорошковых системах на основе ZrO_2 при адсорбции влаги [2] представляет научный и практический

СЕССИЯ 11. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ (ЭНЕРГЕТИКА, ОКРУЖАЮЩАЯ СРЕДА, ГЕОФИЗИКА, КУЛЬТУРНОЕ НАСЛЕДИЕ) интерес для электроники и альтернативной энергетики [3], однако обнаружить его методами РСА до последнего момента не удавалось. Задача была решена с использованием методов дифракции нейтронов.

Эксперименты по изучению фазового состава образцов – прессовок состава $ZrO_2 - 3\% \text{мол } Y_2O_3$ с помощью дифракции нейтронов были выполнены на нейтронном дифрактометре ДН-2 на импульсном быстром реакторе ИБР-2 (ЛНФ ОИЯИ, Дубна, Россия). Большая глубина проникновения нейтронов в материал совместно с корреляционным методом накопления дифракционных данных, позволили разрешить низкотемпературный фазовый переход адсорбционного типа (рис.).

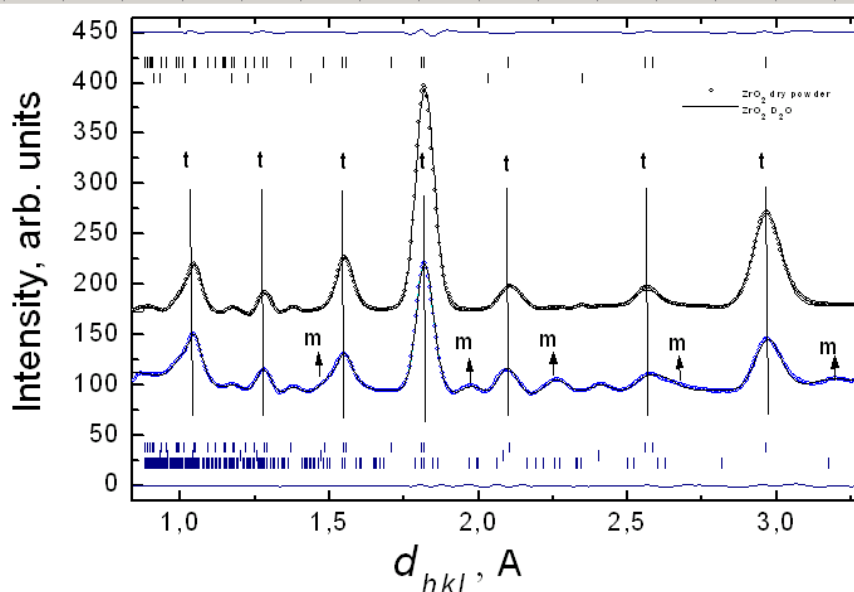


Рис. Спектры нейтронной дифракции компакта (500 МПа) из нанопорошка состава $ZrO_2 - 3\% \text{мол } Y_2O_3$, при температуре $25^\circ C$ (1) и $200^\circ C$ (2).

Табл. Параметры элементарных ячеек T и M – фаз в системе $ZrO_2 - 3\% \text{мол } Y_2O_3$ при различных степенях увлажнения.

	a	b	c	alpha	beta	gamma
T-фаза	3.621128	3.621128	5.178245	90.000000	90.000000	90.000000
M-фаза	5.177876	5.246323	5.323618	90.000000	100.651276	90.000000

Работа поддержана грантом 17-52-45062 инд_a РФФИ. The work was supported through the project H2020/MSCA/RISE/HUNTER/691010 and JINR-Romania Cooperation Program Project of 2018 Order No. 220 / 55.

1. Г. Д. Бочуцава, П. Петров, И. В. Папушкин, Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 11, с. 22–33 (2016)
2. В.И. Алексеевко, Г.К. Волкова, Журнал технической физики, том 70, вып. 9, с.57-62 (2000)
3. A. S. Doroshkevich, A. I. Lyubchuk, at. All., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, Vol. 11, No. 3, pp. 523–529. (2017). DOI: 10.1134/S1027451017030053

Исследование микроструктуры положительных электродов химических источников тока методом малоуглового рассеяния нейтронов

*М. С. Ердаулетов^{1, 2}, М. В. Авдеев^{1, 2}, О. И. Иванов², Ф. С. Напольский^{1, 3},
В. А. Кривченко^{3, 4}*

¹ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ ООО «Инжиниринговый инкубатор», Дубна, Россия

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

Широкое использование возобновляемых источников энергии и электрических транспортных средств сдерживается существующими ограничениями по емкости и энергоэффективности современных накопителей энергии, в частности перезаряжаемых химических источников тока. Наилучшие удельные энергетические характеристики среди аккумуляторов сегодня демонстрируют литий-ионные системы. Несмотря на их высокие показатели (накапливаемая удельная энергия до 250 Вт·ч/кг), ряд актуальных приложений требует более высокой энергоемкости для увеличения периода работы устройств между моментами подзарядки батареи.

Промышленное производство современных литий-ионных аккумуляторов сталкивается с важной проблемой управления микроструктурой наносимых электродных покрытий, без оптимизации которой может наблюдаться существенный проигрыш в удельной энергии и/или мощности устройств. Данная работа выполнена в рамках систематических исследований качественных и количественных закономерностей между микроструктурой катодных покрытий и их удельными характеристиками. С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов изучено влияние проводящих углеродных добавок (сажа, углеродные нанотрубки, восстановленный оксид графена) на микроструктуру положительных электродов на основе перспективных материалов, включая феррофосфат лития LiFePO_4 (LFP) и титанат лития $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO). Для разделения рассеяния на закрытых и открытых порах использовано смачивание электрода в дейтерированном электролите по аналогии с исследованием смачиваемости естественных углеродных материалов [1]. Обнаружено, что рассмотренные добавки (до 10 вес. %) в разной степени уменьшают пористость электродов за счет уменьшения доли открытых пор, т.е. при синтезе углеродные включения с разной эффективностью встраиваются в поры исходного материала.

1. M.V.Avdeev, T.V.Tropin, V.L. Aksenov, et al., Carbon 44, 954 (2006).

Динамика разрушения и эмиссионные явления в геоматериалах

Х. Ф. Махмудов

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

Кинетические представления о разрушении твердых тел открыли принципиальную возможность диагностики работоспособности крупногабаритных конструкций и заблаговременного прогнозирования катастрофических ситуаций. Метод акустической эмиссии позволяет надежно выявить опасный очаг разрушения и следить за его развитием с целью заблаговременного предотвращения катастрофических ситуаций.

Опыт исследования процессов разрушения на действующих крупногабаритных конструкциях позволяет предложить надежную методику диагностики их работоспособности.

Для строящихся крупных объектов предложен мониторинг контроля за процессом разрушения.

Удар по поверхности гранита и кварца вызывает появление вспышек света длительностью около 10 нс каждая, акустической эмиссии и электромагнитной эмиссии.

Если сжимающее давление не превышает $\sim (0,9 - 0,95)$ от разрушающего напряжения, его величина не оказывает заметного влияния на распределение интенсивности излучающих источников.

При давлении, близком к разрушающему, интенсивность наиболее мощных источников плазмы резко возрастает.

Вспышки света возникают при переходе из возбужденного уровня на основной в свободных радикалах SiO^* , акустическая эмиссия отражает возникновение волн деформации, вызванных ударом и рождения около 50 микротрещин диаметром от 2 до 40 мкм.

Спектральная плотность возбуждения массива от удара шаром концентрируется в диапазоне 0,7 - 3,2 кГц. При этом можно выделить несколько характерных размеров блочной структуры массива от 1 м до 6 м.

Максимальная спектральная плотность возбуждения массива находится в области 0,02 - 1,5 кГц. Возбуждаются при этом воздействии структурные элементы с характерными размерами 6-60 м.

Разработана и оптимизирована методика определения координат источника АС для сред с переменным полем скоростей и начата ее адаптация для условий рудника. Разработана методика измерения энергии АС в абсолютной шкале (Дж) и показана возможность ее применения для метрологического обеспечения системы АЭ мониторинга.

1. Махмудов Х.Ф., Савельев В. Н., Савельев Д. В., Медведев В. Н., Круглов С. Ю. Проведение натуральных исследований акустических свойств горного массива и бетонной обделки в подземных сооружениях ФГУП "горно-химического комбината" - предприятие госкорпорации «РОСАТОМ». Сборник материалов: ххiii петербургские чтения по проблемам прочности, посвященные 100-летию фти им.а.ф.иоффе и 110-летию со дня рождения чл.-корр. ан сср а.в.стефанова, стр. 136-13.

Нейтронная радиография и томография габаритных объектов

М. М. Мурашев, В. П. Глазков, Д. Н. Трунов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В последние годы методы интроскопии объектов и изделий получили бурное развитие в различных областях знаний, в том числе в археологии, палеонтологии и изучении объектов культурного наследия. Часто данные объекты имеют значительные размеры, что затрудняет визуализацию внутренней структуры, например, рентгеновским излучением. Нейтронное излучение имеет высокую проникающую способность, что позволяет получать теневые проекции объектов значительной толщины (порядка 100 мм и более, в зависимости от вещества).

При радиографической съемке габаритных объектов невозможно получить изображение сразу всего объекта, по причине ограничений, связанных с размером нейтронного пучка (который в большинстве случаев не превышает 80x80 мм). Из-за чего необходимо получать большое количество радиографических изображений для дальнейшей их сшивки. Для решения этой проблемы была разработана методика съемки габаритных объектов на установке для комплексной радиационной диагностики «ДРАКОН», расположенной на базе реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт». Данная методика включает в себя программу для управления съемкой образца при помощи 7-осевого моторизованного стола, и программу по сшивке отснятых радиографических изображений, по набору которых возможно проведение томографической реконструкции.

В ходе разработки методики был обнаружен ряд особенностей, из-за которых ухудшалось качество сшитых радиографических изображений, по сравнению с каждым кадром в отдельности. Первая особенность была связана с тем, что нейтронный пучок имеет небольшую расходимость ($\sim 1^\circ$) и его нельзя считать абсолютно параллельным. В связи с чем дальняя и ближняя части объекта проецировались на плоскость детектора по-разному, что влекло за собой ошибку при сшивке изображений. Решение данной проблемы заключается, либо в увеличении количества кадров с меньшим шагом перемещения объекта, либо в уменьшении расходимости нейтронного пучка, путем увеличения параметра коллимации (L/D), или установкой соллеровского коллиматора. Вторая особенность заключалась в том, что интенсивность каждого кадра отличалась друг от друга и зависела от того, на сколько исследуемый объект находится в нейтронном пучке. Эта особенность была решена математической обработкой изображений.

Сшитые радиографические изображения габаритных объектов показаны на примере съемки объектов культурного наследия из фондов Государственного Исторического музея.

Применения методов нейтронной радиографии и томографии в исследованиях объектов культурного наследия

*К. М. Назаров, С. Е. Кичанов, Д. П. Козленко, Е. В. Лукин,
А. В. Руткаускас, Б. Н. Савенко*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Археологические объекты, объекты культурного наследия обладают особой ценностью в связи со своей уникальностью и древностью, являясь основным источником информации о прошлом человечества. Поэтому наиболее оправданным выглядят привлечение современных методов неразрушающего контроля для их исследований.

Одним из прогрессивных методов неразрушающего контроля, для исследования структурных особенностей и внутренних макро-неоднородностей археологических объектов, является метод нейтронной радиографии, который заключается в получении нейтронных изображений исследуемых объектов. Различие в нейтронных сечениях поглощения для разных элементов дает информацию о внутреннем распределении неоднородностей исследуемых материалов. Частным случаем метода нейтронной радиографии является нейтронная томография, при которой выполняется реконструкция объемной модели исследуемого образца из набора отдельных радиографических изображений, полученных при различных угловых положениях образца относительно направления нейтронного пучка.

Следует отметить, что в настоящее время большое внимание уделяется уникальным исследованиям физических и химических процессов в археологических останках, связанных с проникновением коррозии или различных солей в толщу различных материалов.

Доклад посвящен изложению результатов исследования археологических объектов с помощью методов нейтронной радиографии и томографии. Все работы были выполнены на установке нейтронной радиографии и томографии НРТ высокопоточного импульсного реактора ИБР-2. Также обсуждаются возможности применения и дальнейшие перспективы этих методов.

Исследование остаточных напряжений в х-образном сварном шве высокопрочной конструкционной стали АБЗА

В. Т. Эм¹, И. Д. Карпов¹, Д. Ю. Артемьев², И. Г. Карпов², К. Е. Садкин²

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

² *ЦНИИ конструкционных материалов «Прометей» им. академика И. В. Горынина, Санкт-Петербург, Россия*

Остаточные напряжения в сварном соединении возникают в результате неравномерных объемных изменений в отвердевшем расплавленном металле шва и основном металле при охлаждении и могут достигать предела текучести и даже превосходить его. Эти напряжения могут сильно ухудшить эксплуатационные характеристики сварных конструкций. Поэтому измерение остаточных напряжений необходимо для более точного расчета прочностных характеристик конструкции, оптимизации параметров сварки и пост-производственной термообработки для уменьшения остаточных напряжений, для верификации существующих расчетных моделей и разработки новых.

В данной работе приведены результаты исследования распределения напряжений по поперечному сечению шва в х-образном стыковочном сварном шве пластин высокопрочной конструкционной стали марки АБЗА толщиной 30мм нейтрон-дифракционным (НД) методом. Изучено влияние закрепления пластин при сварке и влияние пост-производственной термообработки на величину и распределение напряжений. Приведены результаты расчета напряжений методом конечных элементов (КЭ) и сравнение их с результатами эксперимента. Толщина образцов вдоль центральной линии сварочного шва была около 45мм. Измерения проводились на нейтронном дифрактометре «СТРЕСС», установленном на реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт», с пространственным разрешением по высоте образца ~4мм (использовались кадмиевые щели шириной 3мм).

Показано, что растягивающие напряжения в образце, полученном при сварке закрепленных пластин заметно выше, чем не закрепленных. Продольные напряжения вдоль шва больше, чем поперечные и нормальные напряжения. Максимальные продольные напряжения образуются в шве, но не на центральной линии сечения шва, а по обе стороны от неё на расстоянии ~5мм. Численные значения максимальных продольных напряжений близки к пределу текучести (820МПа) материала шва. Термообработка при 600⁰С значительно уменьшает остаточные напряжения. Однако и после отжига остаточные напряжения достаточно высоки (~250МПа).

Показано, что картина распределения остаточных напряжений, полученная методом КЭ, в целом, качественно согласуется с экспериментальными результатами. Однако численные значения напряжений, полученных методом КЭ, как правило, выше полученных НД методом. Рассмотрены возможные причины такого расхождения.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФ 16-12-10065.



Сессия 12.

***Поверхности, тонкие плёнки и
многослойные структуры***

SCIENCE

SCIENCE

Crystallography of 2D Nano- and Micro-patterns in DWBA*B. P. Toperverg**Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre
“Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia*

Specular neutron reflectometry (SNR) is nowadays one of the main tools routinely employed to record scattering length (SLD) depth profile in all kinds of laterally continuous, homogeneous and flat thin films and layered hetero-structures [1-3]. A degree of confidence to the information retrieved from experimental SNR data, however, substantially depends on the validity range of assumptions on continuity, homogeneity, and interfacial flatness over relevant scales. These scales are determined by the coherence properties of neutron radiation exiting from essentially incoherent neutron source and further selected by beam forming devices defining incoming, \vec{k}_i , and scattered, \vec{k}_f , wave vectors with desired uncertainties $\Delta\vec{k}_i$ and $\Delta\vec{k}_f$. These uncertainties can be combined into the 3D resolution tensor, or resolution ellipsoid (RE) reciprocal to the coherence ellipsoid (CE). At specular reflection two of its main axes are displayed within the surface plane, while the third one is normal to the surface. At shallow glancing angles of incidence, $\alpha_i \ll 1$, and scattering, $\alpha_f \ll 1$, CE is strongly anisotropic. Its largest axis parallel to the intersection line of reflection and surface planes can be estimated as $l_x \sim \lambda\alpha^{-1}\Delta\alpha^{-1}$, where $\alpha \sim \alpha_i \sim \alpha_f$, and $\Delta\alpha \ll \alpha$ is uncertainty in glancing angles. Hence, this axis is by the factor $\alpha^{-1} \gg 1$ longer than $l_z \sim \lambda\Delta\alpha^{-1}$, the axis normal to the surface, while the latter is comparable with, or larger than the other in-plane axis $l_y \sim \lambda\Delta\theta_y^{-1}$, where $\Delta\theta_y \geq \Delta\alpha$ is in-plane beam divergence. Therefore, the volume of CE is pretty small, as well as the area of its intersection with the surface plane. On the other hand a conventional description of coherent phenomena such as SNR, or lateral Bragg diffraction assumes infinite surface or infinite number lateral structural elements. Then the finite size effects are taken into account via convolution of the theoretical intensities with the resolution function, while additional incoherent averaging over different CE's is still missing. Meanwhile such averaging is quite important especially due to strong anisotropy of CE. Due to this fact some of CE's may cross with their long axes a number of elements of 2D nano-, or microelement of the lattice hence contributing into Bragg diffraction and SNR. However, other sets of CE's may fall in between of the periodic arrays being reflected from a substrate. As it will be discussed a fraction of the surface contributing into Bragg diffraction, as well as the periods probed of 2D lattices strongly depend on the angle between its principle axes and the plane of SNR. The theoretical consideration will be illustrated with recent experimental data.

1. H.-J.C. Lauter, V. Lauter, A. Glavic & B.P. Toperverg, In: S. Hashmi (editor-in-chief), *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, 1-27 Oxford: Elsevier (2016).
2. B. P. Toperverg, H. Zabel, In: *Neutron Scattering - Magnetic and Quantum Phenomena*, D. L. Price & F. Fernandez-Alonso (eds.), *Experimental Methods in the Physical Sciences*, 339 – 434, Vol. 48, Elsevier, (2015).
3. B. P. Toperverg, *The Physics of Metals and Metallography*, 1337–1375, 116 (2015).

Intermediate phases at ε -Fe₂O₃/GaN and ε -Fe₂O₃/MgO interfaces

V. Ukleev¹, S. Suturin², T. Saerbeck³, T. Hanashima⁴, T. Nakajima⁵, T. Arima^{5, 6},
A. Sitnikova², D. Kirilenko², N. Yakovlev⁷, N. Sokolov²

¹ *Laboratory for Neutron Scattering and Imaging (LNS), Paul Scherrer Institute (PSI), Villigen, Switzerland*

² *Ioffe Institute, Saint-Petersburg, Russia*

³ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

⁴ *Comprehensive Research Organization for Science and Society (CROSS), Tokai, Ibaraki, Japan*

⁵ *RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS), Wako, Japan*

⁶ *Department of Advanced Materials Science, University of Tokyo, Kashiwa, Japan*

⁷ *Institute of Materials Research and Engineering, Agency for Science Technology and Research (A*STAR), Singapore*

The metastable ε -Fe₂O₃ is known to be the most intriguing ferrimagnetic and multiferroic iron oxide phase exhibiting a bunch of exciting physical properties both below and above room temperature [1]. The feasibility to grow the exotic ε -Fe₂O₃ phase along with three other iron oxide phases (Fe₃O₄, α -Fe₂O₃ and γ -Fe₂O₃) has been demonstrated [2]. The present paper unveils the structural and magnetic peculiarities of a few nm thick interface layer discovered in these films by a number of techniques. The polarized neutron reflectometry data suggests that the composition and density of interface layer resembles non-magnetic Ga₂O and soft-magnetic GaFeO₃ depending on the growth conditions. While the in-depth density variation is in agreement with the transmission electron microscopy measurements, the layer-resolved magnetization profiles are qualitatively consistent with the unusual wasp-waist magnetization curves observed by superconducting quantum interference device magnetometry. Interestingly a noticeable Ga diffusion into the ε -Fe₂O₃ films has been detected by secondary ion mass spectroscopy providing a clue to the mechanisms guiding the nucleation of exotic metastable epsilon ferrite phase on GaN at high growth temperature and influencing the interfacial properties of the studied films [3]. The diffusion of Ga ions can be successfully blocked by growth of MgO interlayer between the buffer and iron oxide film.

This work has been supported by RSF (project no. 17-12-01508), RFBR (project no. 18-02-00789). TEM studies have been performed on the equipment of “Material science and characterization in advanced technology” Federal Joint Research Center supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (id RFMEFI62117X0018). V.U. acknowledges support from the Sinergia CDSII5-171003 NanoSkyrmionics.

1. Gich, M. et al., *Advanced Materials*, 26, 4645–4652 (2014).

2. Suturin, S. et al., arXiv 1712.05632 [cond-mat.mtrl-sci] 1712.05632 (2017).

3. Ukleev, V., et al., *Scientific reports*, 8,1, 8741 (2018).

СЕССИЯ 12. ПОВЕРХНОСТИ, ТОНКИЕ ПЛЁНКИ И МНОГОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ
Сенсорные свойства тонких пленок твердого раствора PbCdS добавками различных солей Cd к диоксиду азота

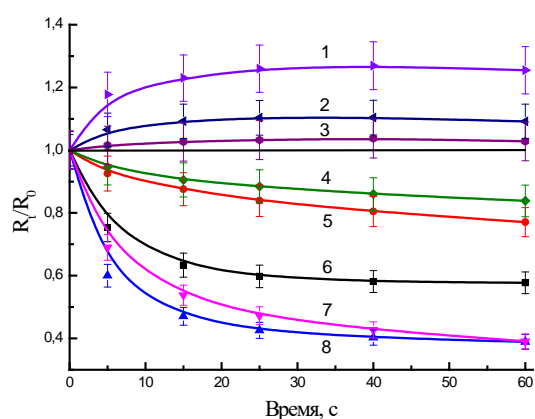
*А. Е. Бездетнова¹, В. Ф. Марков^{1, 2}, Л. Н. Маскаева^{1, 2},
Ю. Г. Шашмурин¹, А. С. Франц¹*

¹ Уральский федеральный университет им. первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

² Уральский институт ГПС МЧС России, Екатеринбург, Россия

Для контроля соблюдения состава выброса токсичного NO₂ необходимо качественно и количественно определить содержание данного газа в выходящей смеси теплоэлектростанций и предприятий, осуществляющих производство азотных удобрений и нитросоединений, кислот [1]. Наиболее перспективными являются адсорбционно - чувствительные элементы. Разработку, поиску и исследованию материалов на основе твердого раствора Cd_xPb_{1-x}S, синтезированного с использованием соли ацетата кадмия, чувствительного к диоксиду азота посвящена данная работа.

Для выбора оптимальной концентрации, предварительно была синтезирована серия пленок с различным содержанием ацетата кадмия в реакционной смеси. Концентрация составляла: 0,005М; 0,01М; 0,02М; 0,04М; 0,06М; 0,08М; 0,1М. При исследовании отклика сенсорных элементов на присутствие в атмосфере диоксида азота, фиксируется изменение омического сопротивления полупроводника R_x/R₀, где R₀ – начальное омическое сопротивление, в отсутствие газа; R_x – омическое сопротивление при контакте газом в момент времени τ. Полученные кривые представлены на рис. Концентрация NO₂ в воздушной среде 100 мг/м³.



Относительное изменение омического сопротивления пленок твердых растворов Cd_xPb_{1-x}S, синтезированных с использованием соли ацетата кадмия с различной концентрацией: 0М (5); 0,005М (6); 0,01М (7); 0,02М (8); 0,04М(4); 0,06М(2); 0,08М(1); 0,1М(3) к NO₂.

Как видно из рис., среди пленок, имеющих схожие результаты отклика, наиболее выделяется концентрация 0,02М ацетата кадмия.

1. Kinetics and mechanism of the gas-phase reaction of water vapor and nitrogen dioxide/ England C., Corcoran W.H. // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1974. V. 13. № 4. P. 373–384.

Исследование адсорбции наночастиц на границах раздела магнитных жидкостей с кремнием методом нейтронной рефлектометрии

*И. В. Гапон^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 3}, Л. А. Булавин^{2, 3}, М. Балашою^{1, 4},
М. Кубовчикова⁵, П. Копчанский⁵, М. В. Авдеев^{1, 6}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт проблем безопасности атомных электростанций НАН Украины, Чернобыль, Украина

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

⁴ Национальный институт физики и ядерной энергетики, Бухарест, Румыния

⁵ Институт экспериментальной физики, Словацкая академия наук, Кошице, Словакия

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

Упорядоченные массивы магнитных наночастиц (МНЧ) представляют текущий интерес из-за различных потенциальных применений в биомедицине [1], катализе [2], оптике и хранении данных [3]. Кроме того, эффекты самосборки наноразмерных объектов интересны и с фундаментальной точки зрения. В связи с этим изучение магнитных жидкостей (МЖ), суспензий коллоидных магнитных наночастиц, покрытых различными стабилизирующими агентами (поверхностно-активные вещества, полимеры), является важным этапом в понимании обсуждаемых процессов. В то же время поведение магнитных наночастиц в объеме и на границах раздела может быть очень различным из-за специфических адсорбционных свойств, которые следует учитывать в самых разных областях применения. Открытый вопрос о различии стабильности феррофлюидов в объеме и на границах раздела сред. Это исследование было направлено на получение структурной информации о самоорганизации магнитных частиц на интерфейсах с магнитными жидкостями. Сравнивалась стабильность МЖ в объеме и на границах их контакта с другими средами. Для получения структуры МЖ в объеме были использованы эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов, а для изучения интерфейсов [4, 5] были проведены эксперименты по рентгеновской и нейтронной рефлектометрии. Было отмечено, что структурная организация наночастиц на границе раздела зависит от концентрации МНЧ в феррофлюидах, а также от структурной организации МНЧ в объеме. Кроме того, нейтронометрией исследовали влияние типа стабилизации МЖ и различных магнитных компонент МЖ на адсорбционные свойства. Было рассмотрено влияние силы тяжести и внешнего магнитного поля на адсорбцию магнитных частиц и их поведение на границе раздела, включая свободные поверхности (воздух / МЖ). Изучены моно- и многослойные структуры феррожидкости на поверхности кремния после испарения жидких носителей. Обсуждается возможность крепления МНЧ с МЖ на подложках внешними магнитными полями.

1. Ito A., Shinkai M., Honda H., Kobayashi T., J. Biosci. Bioeng. 100(1), 1 (2005)

2. Roy S., Pericàs M.A., Org Biomol. Chem., 7, 2669 (2009).

3. Nie Z., Petukhova A., Kumacheva E., Nat Nanotechnol., 5, 15 (2010)

4. Avdeev M.V., Petrenko V.I., Gapon I.V. et al., Appl. Surf. Sci. 352, 49 (2015).

5. Kubovcikova M., Gapon I.V., Zavisova V. et al., J. Magn. Magn. Mater. 427, 67 (2017).

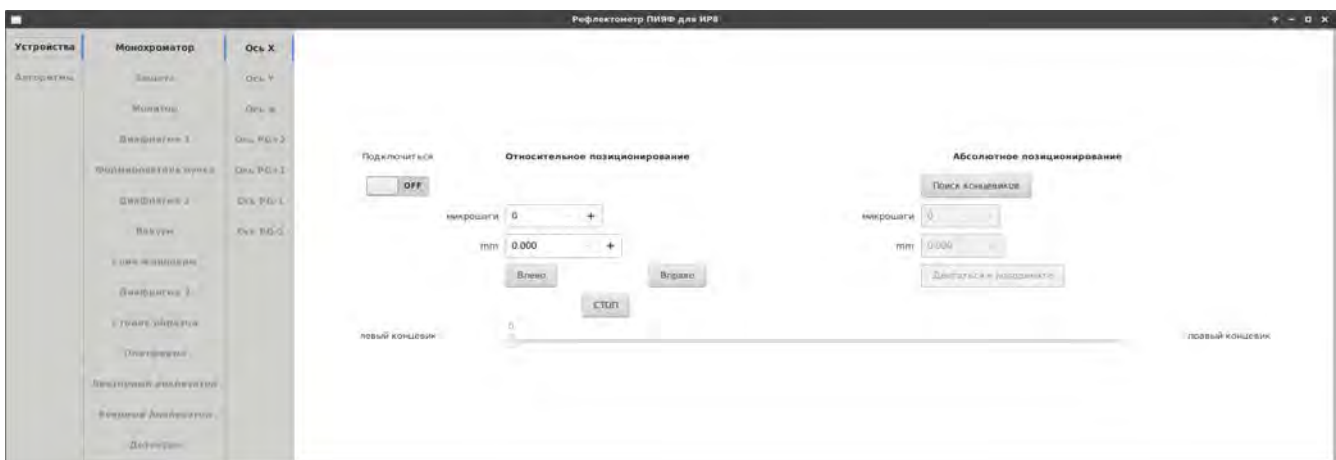
Свободное программное обеспечение рефлектометра поляризованных нейтронов

М. А. Голубев

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

В НИЦ КИ–ПИЯФ был спроектирован и построен Рефлектометр Поляризованных Нейтронов (далее РПН) для исследовательского реактора ИР8 находящегося в Москве. При создании РПН был использован опыт, накопленный коллективом ученых и инженеров НИЦ КИ–ПИЯФ при эксплуатации рефлектометра НР-4М [1] и других экспериментальных установок.

В рамках представленной работы было разработано оригинальное управляющее программное обеспечение ReflectaPNPI. Программа написана на скриптовом языке Python версии 3 и работает под управлением операционной системы GNU/Linux Debian. Для оконного графического интерфейса использована библиотека GTK+ версии 3. Все управляемые устройства, входящие в состав РПН, имеют открытые протоколы управления либо свободные драйверы.



Окно управляющей программы ReflectaPNPI на вкладке управления шаговым двигателем.

Хочу выразить благодарность коллективу, работавшему над созданием РПН за возможность приобретения ценного опыта по автоматизации научно-исследовательской установки.

1. V. G. Syromyatnikov, N. K. Pleshanov, V. M. Pusekov, A. F. Schebetov, V. A. Ulyanov, Ya. A. Kasman, S. I. Khakhalin, M. R. Kolkhidashvili, V. N. Slyusar, A. A. Sumbatyan. Four-modes neutron reflectometer NR-4M. Preprint PNPI 2619 (2005), 47 pages.

Зависимость размера образующихся кристаллитов наночастиц Pt/Pd в кремнеземной матрице от способа ее формирования и количества прекурсора ТЕОС в исходном золе

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

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

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

³ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия*

Настоящая работа посвящена изучению контролируемого формирования кристаллитов наночастиц Pt/Pd в структурирующей кремнеземной матрице, с целью увеличения их каталитической активности и уменьшения расхода металлов, что особенно актуально для металлов платиновой группы.

Размер кристаллитов Pt/Pd, сформированных в сухом золе (ксерогеле) или в тонких пленках толщиной 25 – 35 нм [1] соотносили с величиной области когерентного рассеяния ($D_{окр}$), которую определяли методом РФА на рентгеновском дифрактометрическом комплексе Rigaku SmartLab (CuK α , 9кW, Гатчина, НИЦ КИ ПИЯФ).

Табл. Величина области когерентного рассеяния ($D_{окр}$) кристаллитов наночастиц Pt/Pd в образцах с различным соотношением компонентов «наночастицы Pt/Pd– кремнеземная матрица», термомофиксированных при 250 С.

соотношение, моль	$D_{окр}$, нм				
	1Pt:1Pd:161Si	4Pt:1Pd:52Si	2Pt:1Pd:30Si	1Pt:1Pd:14Si	1Pt:2Pd:11Si
пленка	аморф	<2	6±0,6	6±0,6	8±0,8
ксерогель	4±0,4	5±0,5	10±1	11±1,1	15±1,5

Результаты исследований, приведенные в таблице 1, свидетельствуют о том, что размер кристаллитов находится в прямой зависимости от концентрации солей Pt и Pd в исходном золе. Кроме того, выявлено, что гидролизированный кремнезоль является стабилизирующим агентом в процессе образования кристаллитов при высушивании золя, особенно при формировании пленки, препятствует агломерации зародышевых частиц и упорядочению их кристаллической структуры в процессе термомофиксации.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-03-01201 А.

1. Шилова О.А., Губанова Н.Н., Матвеев В.А., Байрамуков В.Ю., Кобзев А.П. / Состав, структура и морфология поверхности наноразмерных платиносодержащих пленок, получаемых из золь // Физика и химия стекла, №1, 2016, с.112-122.

Исследование структуры тонких пленок PS/C₇₀ методом нейтронной рефлектометрии

М. Л. Карпец¹, Т. В. Тропин², И. В. Гапон^{1, 2}, М. В. Авдеев², Л. А. Булавин¹

¹ Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Тонкие полимерные пленки имеют многочисленные технологические применения в различных промышленных и биомедицинских секторах, связанных с защитными и функциональными покрытиями, не загрязняющими биологическими поверхностями, биосовместимостью медицинских имплантатов, современными мембранами и датчиками. Во многих случаях используемые пленки имеют сложную нанокомпозитную структуру. Полимеры в тонких структурах могут проявлять необычные физические свойства из-за геометрических ограничений, налагаемых наличием поверхностей и наночастиц в матрице. Полистирол-фуллереновые пленки можно рассматривать как модельную систему для исследования этих свойств. Метод нейтронной рефлектометрии был успешно использован при изучении системы PS/C₆₀, позволив оценить структурные особенности упорядочения наночастиц в полимерной матрице [1].

Настоящая работа посвящена нейтронному исследованию структурной организации наночастиц в тонких пленках полистирол-фуллерен C₇₀. С помощью моделирования рассмотрены разные варианты структурной организации наночастиц в полимерной матрице, сравниваются модельные спектры нейтронной рефлектометрии для этих случаев, оценивается качество подгонки модельных кривых без предварительной информации об организации наночастиц. Методом нейтронной рефлектометрии выполнено исследование серии образцов тонких пленок полистирола с разной концентрацией C₇₀. Растворы PS/C₇₀ и dPS/C₇₀ в толуоле были нанесены на кремниевую подложку методом спин-коатинга (скорость 2000 об/мин).

Нейтронные измерения полимерных тонких пленок в диапазоне температур от 16°C до 150°C проводились на приборе ГРЭИНС ИБР-2, ОИЯИ. С этой целью была разработана и изготовлена специальная ячейка для образцов. Проведен анализ кривых отражения, их зависимости от температуры, проанализирована внутренняя структура пленок.

1. Yaklin, M.A., Duxbury, P. M., & Mackay, M. E. Control of nanoparticle dispersion in thin polymer films. *Soft Matter*, 4(12), 2441 (2008).

**Об оптимизации начальной конфигурации интерфейса
в экспериментах *in situ* по нейтронной рефлектометрии**

Е. Н. Косячкин^{1,2}, В. И. Петренко^{1,2}, Л. А. Булавин², М. В. Авдеев¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

Нейтронная рефлектометрия (НР) – неразрушающий метод исследования разнообразного рода плоских интерфейсов в химии поверхности, поверхностного магнетизма и твердых пленок [1, 2]. В настоящее время большой интерес проявляется к экспериментам НР на планарных границах раздела в режиме реального времени с изменением структуры границы раздела (*in situ* эксперименты). Во многих случаях соответствующие изменения в кривых зеркального отражения выражены слабо, поэтому встает вопрос об оптимизации начальной конфигурации интерфейса с точки зрения нейтронной рефлектометрии для получения максимального изменения кривых зеркального отражения при небольших отклонениях структуры интерфейса от его начального состояния.

Цель данной работы – поиск критериев оптимизации начальных параметров исследуемых систем для увеличения чувствительности эксперимента по НР. Рассмотрен способ оценки чувствительности НР для тонкого «несущего» слоя между двумя полубесконечными однородными средами в отношении возникновения и эволюции дополнительного переходного слоя (рис.). Дан пример моделирования и оптимизации границы раздела «электрод-электролит» в электрохимических экспериментах НР [3].

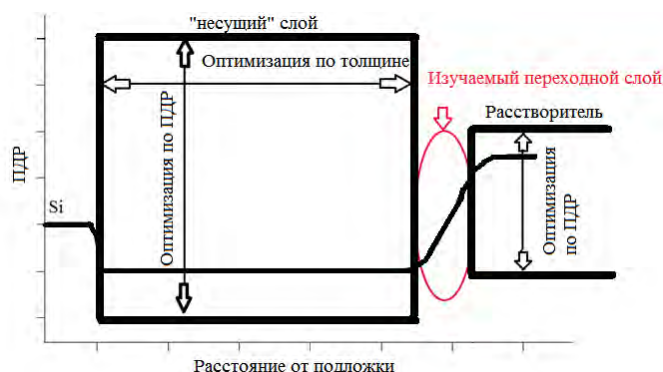


Рис. Схематическое изображение оптимизации профиля плотности длины рассеяния (ПДР) исследуемого интерфейса

1. Fragneto-Cusani, G. (2001). Neutron reflectivity at the solid/liquid interface: examples of applications in biophysics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(21), 4973.
2. Avdeev, M.V. et al. (2017). Monitoring of lithium plating by neutron reflectometry. *Applied Surface Science*, 424, 378-382.
3. Петренко В.И., Косячкин Е.Н., Булавин Л.А., Авдеев М.В. (2018). Об усилении эффекта адсорбционного слоя на границе раздела «металлический электрод – жидкий электролит» в экспериментах по зеркальному отражению в рефлектометрии тепловых нейтронов. *Поверхность* (в печати).

Исследование тонких пленок Ni, Co и Ti, получаемых методами магнетронного напыления

В. А. Матвеев, Н. К. Плешанов, О. В. Геращенко

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

Тонкие пленки некоторых переходных 3-d металлов (Ni, Co, Fe и Ti и их сплавов) используются в качестве структурных элементов покрытий нейтронной оптики. Нанесение таких покрытий осуществляется с помощью магнетронного напыления металлов в аргоновой атмосфере. Характерные толщины слоев лежат в диапазоне от единиц нм до долей мкм.

В данной работе было проведено исследование структуры, магнитных и электрических свойств тонких пленок Ni, Co и Ti толщиной от 5 до 100 нм. В качестве основных методов исследования были выбраны нейтронная и рентгеновская рефлектометрия. С помощью рефлектометрических методов была получена информация о слоистой структуре пленок, а используя рефлектометрию поляризованных нейтронов, изучены магнитные свойства некоторых образцов.

Особое внимание было уделено вопросу естественного окисления тонких пленок в нормальных условиях. В ходе исследования было установлено, что для Ti наблюдается зависимость глубины окисления от исходной толщины пленки (рис.), в тоже время, толщина глубина окисления тонких пленок Co оказалась примерно одинаковой для всех образцов. Мы предполагаем, что это связано с различным размером зерен в пленках и разной концентрацией дефектов, о чем косвенно свидетельствуют результаты измерения удельного электрического сопротивления пленок.

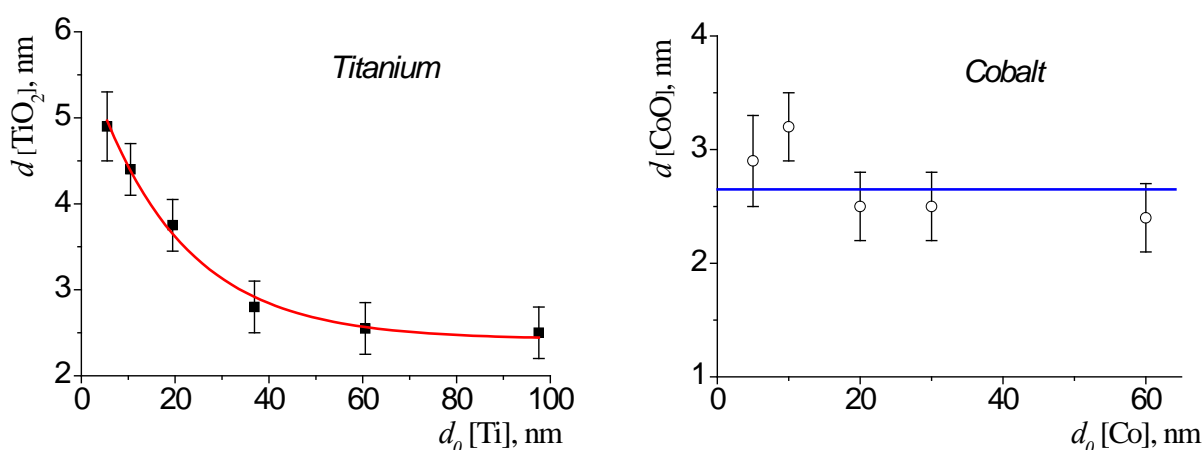


Рис. Зависимость глубины окисления от исходной толщины пленки титана (слева) и кобальта (справа).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, Соглашение №14.607.21.0194 от 26.09.17, проект RFMEFI60717X0194.



Сессия 13.

***Методы исследования вещества,
комплементарные нейтронному
рассеянию***

SCIENCE

SCIENCE

Применение адаптивной рентгеновской оптики для исследования деформационных процессов в кристаллах фторида лития (LiF) и кремния (Si) под действием внешней механической нагрузки

*В. И. Аккуратов, Я. А. Элиович, А. В. Таргонский, А. Е. Благов,
Ю. В. Писаревский*

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

² *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

Доклад посвящен применению времяразрешающего рентгенодифракционного метода, основанного на использовании адаптивных рентгенооптических изгибных элементов, для наблюдения необратимых структурных деформационных процессов в кристаллических материалах, находящихся под внешней механической нагрузкой.

Этот метод позволяет получать информацию об изменениях в атомной структуре, записывая кривые дифракционного отражения (зависимость интенсивности рентгеновского излучения от углового положения в окрестности угла Брэгга), используя немеханическое управление рентгеновским пучком с помощью адаптивного изгибного рентгенооптического элемента. Такой элемент состоит из бидоменного биморфного монокристалла LiNbO_3 , обладающего пьезоэффектом, и прикрепленной к его грани кремниевой пластины. При подаче управляющего электрического сигнала на ниобат лития можно управлять параметрами рентгеновского пучка [1]. Временное разрешение зависит от яркости источника рентгеновского излучения и достигает сотен микросекунд.

С помощью предлагаемого метода была исследована эволюция дефектной структуры кристаллов кремния (Si), подвергнутого механическому сжатию, и фторида лития (LiF), при вибрации в килогерцовом диапазоне частот. Для того, чтобы подвергнуть кристалл-образец вибрационной нагрузке, к нему прикреплялся кристалл-анализатор, обладающий обратным пьезоэффектом, на который затем подавался электрический сигнал необходимой частоты. В результате такой нагрузки происходят появление новых дефектов и смещения атомных плоскостей, которые легко могут быть замечены по изменениям параметров кривых дифракционного отражения.

Представленный подход дает возможность получать информацию об изменениях в кристаллической структуре с меньшей временной задержкой по сравнению с уже существующими методиками, что является востребованным в научных исследованиях и производственных процессах.

1. Благов А.Е., Быков А.С., Кубасов И.В., Малинкович М.Д., Писаревский Ю.В., Таргонский А.В., Элиович Я.А., Ковальчук М.В. // Приборы и техника эксперимента 2016. Т. 59. № 5. С. 728-732

**Исследование динамики кристаллической решётки FeSi с помощью
синхротронного излучения**

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

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

² Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия

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

Интересно, что, несмотря на одинаковую кристаллическую структуру (структурный тип B20, пространственная группа $P2_13$), моносилициды и моногерманиды 3d металлов (FeGe, FeSi, MnGe, MnSi, CoGe, CoSi) имеют очень разнообразные электронные и магнитные свойства. Среди этих соединений FeSi стоит несколько особняком, являясь, пожалуй, самым удивительным. Так при низких температурах FeSi - полупроводник, но при нагреве становится металлом. Кроме того, необычное температурное поведение демонстрируют магнитная восприимчивость, модули упругости, теплоёмкость и тепловое расширение. Естественно ожидать, что природа такого поведения связана с межатомным взаимодействием и динамикой кристаллической решётки. В самом деле, недавние исследования показали, что с увеличением температуры происходит аномальное смягчение спектра тепловых колебаний атомов (фононов) [1]. В последних работах в этой области приводятся различные интерпретации аномалии физических свойств. Некоторые авторы пишут о доминирующей роли теплового беспорядка [1], другие о роли спин-фононного взаимодействия (магнетизма FeSi) [2], тогда как третьи о роли электрон-фононного взаимодействия [3]. В данной работе дисперсия фононов в FeSi была исследована методом неупругого рассеяния в Европейском Центре Синхротронного Излучения (ESRF). Были выявлены фононы, в наибольшей степени смягчающиеся с температурой в диапазоне 100 – 300 К. Сопоставление экспериментальных данных с результатами моделирования динамики решетки позволяет заключить, что это смягчение, главным образом, обусловлено изменением силовой константы связи Fe-Fe, заметно убывающей при нагреве вследствие металлизации соединения.

Авторы благодарят за поддержку Российский Научный Фонд (грант № 17-1201050).

1. O. Delaire, I. I. Al-Qasir et al., Phys. Rev B 87, 184304, (2013)

2. S. Krannich, Y. Sidis, et al., Nat. Commun., 6, 8961 (2015).

3. P. P. Parshin, A. I. Chumakov, et al., Phys. Rev. B 93, 081102(R) (2016).

**Исследование ферромагнитных наночастиц в матрице МСМ-41
комплементарными методами**

*Н. А. Григорьева¹, Х. Эккерлебе², А. А. Елисеев³, А. В. Лукашин³,
К. С. Напольский³, С. В. Григорьев^{1, 4}*

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

² Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

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

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

Структура и магнитные свойства мезопористых систем на основе диоксида кремния с регулярным гексагональным расположением нанопор, заполненных нанонитями соединений железа в различном химическом состоянии исследовались взаимодополняющими методиками: электронной микроскопии, SQUID-магнитометрии, электронного парамагнитного резонанса, мессбауэровской спектроскопии, малоугловой дифракции поляризованных нейтронов и дифракции синхротронного излучения. Показано, что наночастицы железа в порах находятся в состоянии Fe_2O_3 преимущественно в γ -фазе с небольшим добавлением α -фазы и кластеров атомарного железа. При этом величина эффективного магнитного поля, действующего на данную нить со стороны остальных нанонитей, составляет 11 мТ и имеет дипольную природу, температура перехода ферромагнетик / парамагнетик находится в интервале от 76 К до 94 К, в зависимости от температуры отжига образцов, температура, соответствующая изменению магнитного состояния нанонитей оксида железа, равна $T \approx 50 \div 60$ К в поле $H = 0$ мТ и $T \approx 80$ К в поле $H = 300$ мТ. Также показано, что процесс перемагничивания массива нанонитей обусловлен магнитостатическим взаимодействием между нанонитями в диапазоне полей меньших поля насыщения.

**Исследование трехмерного искусственного спинового льда с помощью
совместного применения малоуглового рассеяния нейтронов и
микромагнитного моделирования**

*И. С. Дубицкий¹, А. В. Сыромятников^{1, 2}, Н. А. Григорьева², А. А. Мистонов²,
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*

Развитие методов синтеза ферромагнитных наноструктур позволило создавать трехмерно-упорядоченные наносистемы, проявляющие необычные магнитные свойства [1]. Однако методы исследования распределения намагниченности в подобных системах в настоящее время только начинают развиваться. Одним из наиболее перспективных способов изучения магнитной структуры трехмерных наносистем является малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН). В то же время детальная интерпретация экспериментальных данных, полученных при исследовании неоднородно намагниченных наноструктур, часто бывает затруднена. Информацию о магнитной структуре можно получить посредством сравнения результатов экспериментов и микромагнитного моделирования. Вычисленный Фурье образ распределения намагниченности в изучаемой структуре может быть непосредственно сопоставлен с результатами МУРН. Настоящая работа посвящена реализации данной программы для инвертированных опалов (ИО), выполненных из кобальта.

ИО можно получить с помощью заполнения пустот между микросферами, образующими ГЦК решетку, ферромагнитным металлом с последующим удалением самих сфер. В результате формируется периодическая ферромагнитная сеть наноузлов в форме тетраэдров и кубов, связанных между собой перемычками вдоль направлений $\{111\}$ ГЦК структуры [2]. ИО, период структуры которых составляет 700 нм, являются единственными известными представителями класса трехмерных искусственных спиновых льдов [3, 4].

Эксперименты были проведены для трех направлений приложения внешнего магнитного поля, соответствующих трем различным сценариям взаимодействия правила спинового льда и поля. Для интерпретации результатов измерений были вычислены соответствующие зависимости Фурье образа распределения намагниченности в элементарной ячейке от величины поля. Сопоставление результатов вычислений и экспериментальных данных МУРН позволило определить магнитное состояние исследованных систем в некоторых характерных полях.

1. A. Fernández-Pacheco, et. al.. Nature Communications, 8, 15756, (2017)

2. N. A. Grigoryeva, et. al.. Physical Review B, 84(6), 064405, (2011)

3. A. A. Mistonov, et. al.. Physical Review B, 87(22), 220408, (2013)

4. I. S. Dubitskiy, et. al.. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 441, 609-619, (2017)

**Визуализация трехмерного распределения компонент в составе
биметаллических наночастиц AgAu в силикатных стеклах по данным
EXAFS-спектроскопии**

С. Ю. Кантелин¹, В. В. Срабионян¹, М. Хайнц², Л. А. Бугаев¹

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

² Галле-Виттенбергский университет им. Мартина Лютера, Галле, Германия

В настоящей работе представлены результаты исследования плазмонных серебряно-золотых биметаллических наночастиц.

Плазмонные наночастицы дают возможность локализовать электромагнитное поле в масштабах меньших, чем длина волны в оптическом диапазоне. Это свойство полезно для применения подобных объектов для создания нанодетекторов, в процессах преобразования и хранения энергии, в задачах обработки и передачи данных. В частности, создание компьютерных микросхем с плазмонными элементами вместо традиционных полупроводниковых позволит увеличить их производительность и энергоэффективность. Глобальная задача, представленная перед нами, это получение массивов плазмонных наночастиц с управляемыми оптическими свойствами. Для этой цели предложено использовать биметаллические наночастицы состава AgAu, поскольку возможность варьирования пика оптического поглощения в них путем изменения условий синтеза и пост-обработки значительно выше по сравнению с монометаллическими частицами и пленками [1, 2]. Объемное распределение компонент в составе наночастицы необходимо для моделирования спектров оптической экстинкции исследуемых массивов наночастиц. В данной работе представлены результаты исследования образцов с помощью EXAFS-спектроскопии и на основе этих данных построены трехмерные модели, демонстрирующие распределения атомов золота и серебра в составе усредненной по образцу наночастицы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00818 мол_а «Влияние компонентного состава и архитектуры биметаллических наночастиц AgAu на их оптические свойства».

1. M. Dubiel, M. Heinz, et al., Generation and characterization of plasmonic nanostructures in glass surfaces by means of excimer and solid state laser irradiation, International Society for Optics and Photonics, Volume 9163, August 2014, p. 91631M.
2. Y.-H. Su, W.-L. Wang, Surface plasmon resonance of Au-Cu bimetallic nanoparticles predicted by a quasi-chemical model, Nanoscale Research Letters, 2013, Volume: 8, Issue: 1, p. 408

**Времяразрешающая лабораторная рентгеновская дифрактометрия для
изучения быстропротекающих структурных изменений в кристаллах,
вызванных электрическим воздействием**

*А. Г. Куликов, Н. В. Марченков, А. А. Петренко, Ю. В. Писаревский,
А. Е. Благов, М. В. Ковальчук*

*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

На сегодняшний момент актуальной задачей является развитие подходов к in-situ исследованиям динамики процессов, происходящих в образцах, в частности, подвергающихся внешним воздействиям. Для рентгеновской дифрактометрии временное разрешение может быть достигнуто при помощи уникальной адаптивно-управляемой рентгеновской оптики, работающей на изгибных колебательных модах [1]. Другим перспективным подходом является использование быстродействующей системы детектирования для измерения временной развертки поведения дифракционной картины с синхронизацией различных элементов схемы между собой [2].

Разработан аппаратно-методический комплекс на лабораторном оборудовании для проведения времяразрешающих рентгенодифракционных исследований как обратимых, так и необратимых процессов в реальной кристаллической структуре, индуцированных воздействием внешнего электрического поля. Максимальное эффективное временное разрешение, достигнутое в эксперименте по измерению динамики дифракционного пика пьезоэлектрического кристалла лантан-галлиевого силиката ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) с высоким структурным совершенством в двухкристальной схеме рентгеновской дифракции в условиях воздействия электрическим полем 2,8 кВ/мм, составило 100 мкс на лабораторном источнике излучения. Также представлены результаты измерения карт обратного пространства с временным разрешением до 10 мс. В дальнейшем, временное разрешение может быть улучшено на синхротронной экспериментальной станции благодаря использованию более яркого пучка. В кристаллах тетрабората лития ($\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$) обнаружен процесс изменения положения и формы кривой дифракционного отражения рефлекса (008), вызванный миграцией ионов лития к поверхности кристалла под действием электрического поля, который был отделен по времени от более быстрого пьезоэлектрического эффекта.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 18-32-00410 мол_а, 16-32-60045 мол_а_дк).

1. A. E. Blagov, A.G. Kulikov, et al., *Experimental Techniques* 41, 517–523 (2017)
2. S. Gorfman, *J. Appl. Phys.* 108, 064911 (2010)

Предметы с орнаментом из кургана Чёрная могила (X век)

*К. М. Подурец¹, Е. С. Коваленко¹, М. М. Мурашев¹, В. П. Глазков¹,
Н. Н. Колобылина¹, И. А. Чичаев¹, Е. Ю. Терещенко^{1, 2}, В. В. Мурашева³,
Е. Б. Яцишина¹, М. В. Ковальчук^{1, 2}*

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

² *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

³ *Государственный исторический музей, Москва, Россия*

В НИЦ «Курчатовский институт» проведено комплексное исследование нескольких артефактов из археологического памятника Древней Руси конца X века – кургана «Чёрная могила», находящихся в коллекции Исторического музея. Артефакты сильно пострадали от погребального огня и последующего длительного нахождения в земле. Первоначальный облик предметов исказил и слой «мастики», которой были покрыты предметы в процессе реставрации. Ввиду того, что предметы составляют часть музейной коллекции, исследование проводилось неразрушающими методами. Целью исследования было изучение их строения, особенностей декорирования и сохранности.

Для визуализации внутреннего строения предметов использовались методы синхротронной и нейтронной радиографии и томографии. Для изучения элементного состава материалов, составляющих артефакты, применялась растровая электронная микроскопия с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом.

Наиболее интересные результаты были получены при исследовании трех предметов неизвестного назначения. Они представляют собой железные пластины с фестончатыми краями, на одном из них имеется рукоятка. На двух из них был обнаружен орнамент, скрытый слоем окислов и «мастики». Орнамент представляет собой ленточное плетение, выполненное с помощью инкрустации серебряной проволокой. Кроме того, изучены наконечник стрелы и наконечники копий. На этих предметах также выявлен сложный декор: на стреле – растительный орнамент, на копьях – геометрический.

Данное исследование показывает перспективность использования неразрушающих методов синхротронной и нейтронной радиографии и томографии, в сочетании с другими методами, в исследовании артефактов из музейных коллекций.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-18-01-399.

**Сравнение нейтронного Комптоновского рассеяния на аморфных и
поликристаллических бинарных сплавах бериллия и циркония**

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

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *ISIS, Лаборатория Резерфорда в Англтон, Оксфорд, Великобритания.*

³ *Школа Науки и Технологии, Общественный Ноттингемский Университет, Ноттингем,
Великобритания*

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

⁵ *Факультет Физики и Астрономии Университетского колледжа Лондона, Лондон,
Великобритания*

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

Работа выполнена при частичной поддержке Российского Научного Фонда, (грант 16-12-10065).

1. Suck J B *et al.* 1983 *Phys. Rev. Lett.* 50 49

2. Calvo M *et al.* 1993 *Journal of Non-Crystalline Solids* 156-158 53

3. Otomo T, Arai M, Suck J B and Bennington S 2002 *Journal of Non-Crystalline Solids* 312-314 599 { 602

4. Calvo M *et al.* 2006 *Phys. Rev. Lett.* 96 135501

СЕССИЯ 13. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА, КОМПЛЕМЕНТАРНЫЕ
НЕЙТРОННОМУ РАССЕЯНИЮ

5. Hafner J 1983 *J. Phys. C* 16 5773
6. Bratkovsky A M *et al.* 1993 *J. of Non-Cryst. Solids* 156158 72
7. Page R D 1976 Canadian power reactor fuel Tech. Rep. AECL-5609 Atomic Energy of Canada
8. Park C H *et al.* 1998 *Journal of Nuclear Materials* 254 34
9. Haydock R 180 *Solid State Phys.* 35 215
10. Jiang Q, Xia H, Zhang Z and Tian D 1992 *Chem. Phys. Lett.* 192 93
11. Strykh G *et al.* 2008 *J. Phys. Condens. Matter* 20 104241
12. Montfrooij W *et al.* 1989 *Phys. Rev. Lett.* 63 544
13. Bosse J *et al.* 1986 *Phys. Rev. Lett.* 57 3277
14. Schram R P C 1991 *Phys. Rev. A* 44 8062
15. Alvarez M *et al.* 1998 *Phys. Rev. Lett.* 80 2141
16. Enciso E *et al.* 1995 *Phys. Rev. Lett.* 74 4233
17. T B and I M 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* 14 L445
18. Fernandez-Perea R *et al.* 1999 *Phys. Rev. E* 59 3212
19. Campa A and Cohen E G D 1990 *Phys. Rev. A* 41(10) 5451 {5463
20. Krzystyniak M, Druzbecki K and Fernandez-Alonso F 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17(46) 31287-31296
21. Krzystyniak M *et al.* 2011 *Faraday Discuss.* 151(0) 171-197
22. Andreani C, Senesi R, Krzystyniak M, Romanelli G and Fernandez-Alonso F 2017 *Neutron Scattering - Applications in Biology, Chemistry, and Materials Science (Experimental Methods in the Physical Sciences vol 49)* ed Fernandez-Alonso F and Price D L (Academic Press) pp 403 – 457

**Рентгеноспектральные исследования особенностей локальной атомной и
электронной структуры нанокопозита PANI/Cu**

В. А. Шматко, Г. Э. Яловега, Т. Н. Мясоедова

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Полианилин (PANI) находит широкое применение в различных областях науки и техники благодаря своим уникальным окислительно-восстановительным свойствам, электропроводимости и термостабильности. Одним из способов улучшения характеристик PANI является легирование солями щелочных металлов. Вариация свойств, в частности электропроводности, таких материалов объясняется изменениями их электронного строения, химических связей, морфологии вследствие взаимодействия металлосодержащей и полимерной составляющей.

В настоящей работе методом рентгеновской спектроскопии поглощения XANES был исследован медьсодержащий наноккомпозит на основе полианилина, полученный путем химического окисления анилина без добавления кислоты с добавлением в реакционную смесь дигидрата хлорида меди. Затем образцы были термостатированы при 90 °С. Экспериментальные спектры рентгеновского поглощения XANES были получены с использованием оборудования станций Materials Science синхротрона Elettra (Италия, Триест) и Структурное материаловедение Курчатовского источника синхротронного излучения.

Как показали СЭМ- микрофотографии, морфология образованного наноккомпозита сформирована агломератами пластинчато- и палочкообразных структур, с толщиной и диаметром порядка 100 нм соответственно

Анализ XANES спектров за К-краем меди показали, что медь входит в наноккомпозит двухвалентная, при этом ионы меди имеют октаэдрическое окружение. Локальное окружение меди в композите отличается от локального окружения меди в исходной медсодержащей компоненте.

Изменения в низкоэнергетической области спектров XANES за К-краем углерода и азота указывают на трансформацию π электронной подсистемы полимера при образовании наноккомпозита, что, по всей видимости, связано с взаимодействием медьсодержащей и полимерной составляющих при образовании композита.

Работа выполнена в рамках Гранта Президента №41.У30.18.4933-МК и частично в рамках Внутреннего гранта ЮФУ (ВнГр-07/2017-30).

***In situ* синхротронное исследование слоистых двойных гидроксидов**

М. Х. Юзвюк¹, И. А. Зобкало¹, М. В. Сердечнова², М. Л. Желудкевич²

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

² *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

В настоящее время большое внимание уделяется поиску новых высокоэффективных защитных антикоррозийных материалов. Слоистые двойные гидроксиды (СДГ) отличаются высокой анионообменной активностью, что определяет возможность их применения в качестве микро- и нанорезервуаров. Применение СДГ в качестве защитных материалов возможно при интеркаляции в них органических и неорганических соединений в их анионных формах – ингибиторов коррозии – с их последующим контролируемым выделением. Для большинства СДГ применима формула $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^{y-}]_{x/y} \cdot zH_2O$, где М – металлические ионы, А – межслойный ион. Структурно СДГ представляют из себя положительно заряженные гидроксидные слои с металлическими ионами, разделенные анионами и молекулами воды. Обычно описываются гексагональной сингонией, с пространственной группой R -3m.

В работе было проведено исследование процессов анионного обмена в СДГ между нитратом (NO₃) и ионами хлора на цинковой (Zn-СДГ-Cl) и алюминиевой подложках (Al-СДГ-Cl). Методом синхротронного рассеяния исследовались процесс замещения *in situ* и получившиеся структуры. СДГ-Cl в обоих случаях описывается ромбоэдрической пространственной группой R -3m. Параметры элементарных ячеек согласуются с литературными [1, 2] данными и представлены в таблице.

Для оценки средних размеров кристаллитов родительского СДГ (СДГ-NO₃) и полученных соединений вдоль оси *c* и плоскости *a-b* использовались отражения 006 и 110 соответственно. В ходе интеркаляции размеры кристаллитов уменьшились: от $L_a = 107.0 \pm 7.5$ нм до $L_a = 78.4 \pm 5.5$ нм и от $L_c = 49.4 \pm 3.4$ нм до $L_c = 30.9 \pm 2.2$ нм.

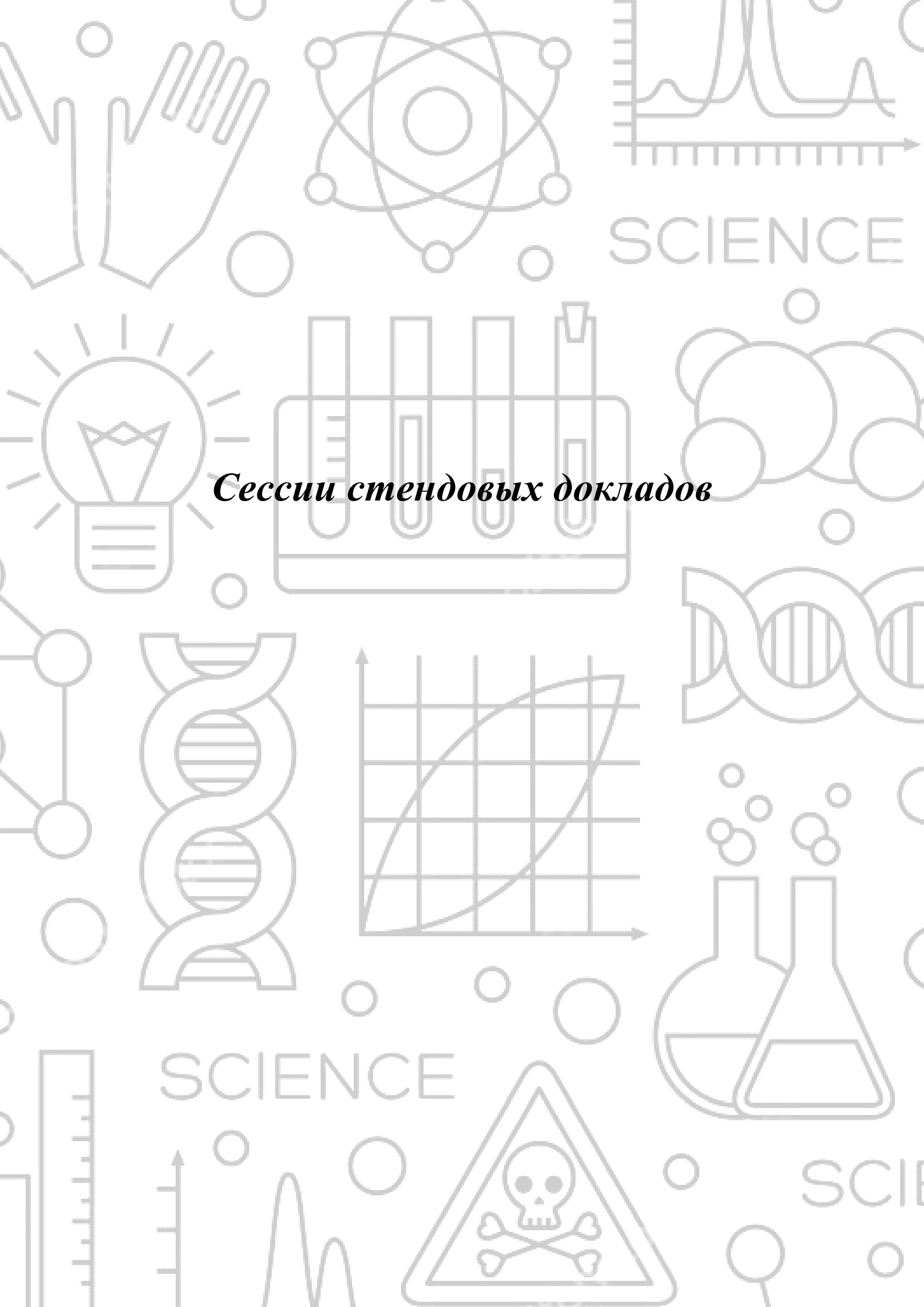
В ходе анализа полученных дифракционных данных было отмечено появление аморфной составляющей в обоих образцах, что может свидетельствовать о появлении продуктов коррозии в ходе анионного обмена.

Табл. Параметры элементарных ячеек исследуемых соединений.

Соединение	a, Å	c, Å
Zn-LDH-Cl	3.0826(2)	23.3595(48)
Al-LDH-Cl	3.0761(9)	23.3847(41)

Работа выполнена в рамках и при частичной финансовой поддержке проекта MULTISURF (№ 645676 в рамках программы Horizon 2020 Marie Skłodowska-Curie actions).

1. A. V. Radha, P. Vishnu Kamath, and C. Shivakumara, J. Phys. Chem. B, 111, 13 (2007).
2. J. Pison et al., J. Phys. Chem. B 112, 26 (2008).



SCIENCE

Сессии стендовых докладов

SCIENCE

SCIENCE

Interband absorption of quantum well in magnetic field

R. G. Abaszade, V. R. Figarov, R. Y. Bakhishli

Azerbaijan National Academy of Sciences, Baku, Azerbaijan

Optical phenomena in systems of lower dimensionality have attracted great attention. As a result of the spatial limitation of electrons, there are quantum-sized effects in such systems that cause certain boundary conditions for the wave function. Limiting the movement of the electrons leads to the energy spectrum quantization, which in turn leads to features of optical phenomena, compared with bulk crystals. Study of influence of magnetic field on optical absorption in quantum-sized structures is one of directions of investigation in these systems [1-5]. When the electromagnetic wave is normal to the quantum-sized system surface, the interband absorption.

In this paper, we theoretically calculate interband optical absorption in a quantum well with parabolic potential situated in longitudinal magnetic field.

We have obtained for interband optical absorption the following expression:

$$\alpha = \frac{2\pi K_B T \omega^2 n_e}{c \sqrt{\epsilon(\omega)} \omega_0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{(2n+1)\hbar\omega}{2K_B T}} [n\delta(\Omega + \omega) - (n+1)\delta(\Omega - \omega)]$$

Where: $\epsilon(\omega)$ is the real part of permittivity, $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$, $\omega_c = \frac{eH}{mc}$ is the electron cyclotron frequency, e is the charge modulus, c is the light velocity, n is the Landau level number, charge modulus, \vec{H} is the magnetic field strength, ω_0 is the parabolic potential parameter.

1. Galkin N.G., Margulis V.A., Shorokhov A.V. Intraband absorption of electromagnetic radiation by quantum nanostructures with parabolic confinement potential//, Physics of Solid State, 2001, vol.43, pp.530-538.
2. Ibragimov G.B. Intersubband optical absorption in parabolic quantum wires under a tilted magnetic fields//, Phys.stat.sol.(b) 2004, v.241, p.1923-1927.
3. Hashimzade F.M., Ismailov T.G., Mehdiyev B.H. Influence of external transverse electric and magnetic fields on the absorption of a parabolic quantum wire//, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 27 (1), 140-150 (2005)
4. Ibragimov G.B., Abaszade R.G., İbayeva R.Z. Theory of free-carrier absorption in cylindrical quantum wires// International Journal of Latest Research in Science and Technology, vol 3, Issue 4: India - 2014, pp.78-80.
5. Karpunin V.V., Margusil V.A. Absorption of electromagnetic radiation in a quantum wire with an anisotropic parabolic potential in a transverse magnetic field// Semiconductor Structures, Low-dimensional Systems, and Quantum Phenomena, 2016, Vol.50, pp. 769–774.

Cross sections of the $^{66}\text{Zn}(n, \alpha)^{63}\text{Ni}$ reaction at 4.0, 5.0 and 6.0 MeV

*Yu. M. Gledenov¹, I. Chuprakov^{1, 2}, M. V. Sedysheva¹, E. Sansarbayar^{1, 6},
Guohui Zhang³, Zhimin Wang³, Xiao Fan³, Luyu Zhang³, Huaiyong Bai³,
Jinxiang Chen³, L. Krupa^{1, 4}, G. Khuukhenkhuu⁵*

¹ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

² *The Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan*

³ *State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Institute of Heavy Ion Physics, Peking University, Beijing, China*

⁴ *Institute of Experimental and Applied Physics, Czech Technical University in Prague, Prague, Czech Republic*

⁵ *Nuclear Research Centre, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia*

Cross sections of the $^{66}\text{Zn}(n, \alpha)^{63}\text{Ni}$ reaction were measured at $E_n = 4.0, 5.0$ and 6.0 MeV performed at the 4.5-MeV Van de Graaff Accelerator of Peking University, China. A double-section gridded ionization chamber was used to detect the alpha particles. The foil sample of enriched ^{66}Zn was placed at the common cathode plate of the chamber. Monoenergetic neutrons were produced by a deuterium gas target through the $^2\text{H}(d, n)^3\text{He}$ reaction. The neutron flux was monitored by a BF₃ long counter. Cross sections of the $^{238}\text{U}(n, f)$ reaction were used as the standard to perform the (n, α) reaction measurement. Present results are compared with existing measurements, evaluations and TALYS-1.6 code calculations.

1. M. B. Chadwick, E. Dupont, E. Bauge, A. Blokhin, et al., Nuclear Data Sheets, 118, 1 (2014).

2. ENDF: Evaluated Nuclear Data File, database version of September 02, 2014, <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>

3. X. Zhang, Z. Chen, Y. Chen, J. Yuan, G. Tang, G. Zhang, J. Chen, Y. M. Gledenov, G. Khuukhenkhuu, and M. Sedysheva, Physical Review C 61, 054607 (2000).

4. Yu. M. Gledenov, M. V. Sedysheva, V. A. Stolupin, Guohui Zhang, Jinhua Han, Zhimin Wang, Xiao Fan, Xiang Liu, Jinxiang Chen, G. Khuukhenkhuu, and P. J. Szalanski, Physical Review C, 89, 064607 (2014).

5. J. F. Ziegler, SRIM-2013, <http://www.srim.org/#SRIM>.

Investigation of The Structure and Morphology of HDPE+ZrO₂ Polymer Nanocomposites by SANS and SAXS methods

*A. A. Nabiyev^{1, 2}, A. Kh. Islamov², D. S. Linnik^{2, 3},
A. S. Doroshkevich^{2, 4}, A. I. Kuklin^{2, 5}*

¹ ANAS Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³ Donetsk National University, Donetsk, Ukraine

⁴ Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O. O. Galkin, Kuiv, Ukraine

⁵ Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia

Gamma radiation process for modification of polymer nanocomposites is a widely applied technique to promote new physical, chemical and mechanical properties. The radiation not only alters the chemical structure of the polymer, but it can also enhance the presence of trapped charges or creates defects in the polymer matrix changing the dielectric, electrical and thermal properties of irradiated polymer. Therefore, the field of ionizing radiations is an interesting field of research as an approach for the preparation of materials with enhanced properties [1]. The objective of the present work is to investigate the effects of various gamma irradiation on the structural properties of pure high-density polyethylene (HDPE) and HDPE+ZrO₂ nanocomposites investigated. Gamma irradiation was carried out in atmospheric air to a maximum dose of 500 kGy. Structural properties of HDPE+ZrO₂ nanocomposites were studied by small-angle neutron scattering (SANS) and small-angle X-ray scattering (SAXS) in this work.

Small-angle neutron scattering (SANS) measurements were performed at the time-of-flight YuMO spectrometer situated at IBR-2 pulsed reactor, JINR, Dubna, Russia [2]. SAXS experiments were carried out on a Rigaku X-ray instrument with high-speed Cu rotating anode (SMAXS 3000 Point SAXS system, at MIPT, Dolgoprudny, Russia) using a standard transmission configuration.

SANS experiments showed ZrO₂ nanoparticles mainly distributed in polymer matrix as homogeneous monodisperse system. Due to the SANS results that the case of $n = 4$ shows the absence of a diffuse border region between the polymer matrix and the filler particle. This in turn indicates that there is no interaction between the polymer and the filler. The SANS results shows that there are crystalline spherulite formations consisting of polyethylene lamellas in the polymer. Gamma irradiation leads to an increase in the content of crystallites in the polymer. In addition, there is no increase in the content of crystalline formations even at the maximum doses of irradiation.

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

1. M. E. Gouda, T. Y. Elrasasi, OSR Journal of Applied Physics (IOSR-JAP) e-ISSN: 2278-4861. Volume 7, Issue 6 Ver. II (2015).

2. A. I. Kuklin, A. Kh. Islamov and V. I. Gordeliy, Neutron News 16 16 (2005)

SANS method study of the properties of mixture system C10E7 with sugars in heavy water solutions

A. Rajewska^{1,2}, K. Mędrzycka³, I. Kłosowska-Chomiczewska³

¹ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

² *National Centre for Nuclear Research, Świerk-Otwock, Poland*

³ *Technical University Gdansk, Gdansk, Poland*

The mixture system of non-ionic classic surfactant C10E7 (heptaethylene glycol monodecyl ether) ($c=50\text{mM}$) with sugars (glucose, fructose and sucrose) in heavy water solutions was investigated at temperatures 15°C, 30°C, 45°C for compositions with the same amount of three sugars (0.05M, 0.2M, 0.3M, 0.5M) by the small-angle neutron scattering (SANS) method on spectrometer ('YuMO') at the IBR-2 pulsed neutron source at FLNP, JINR in Dubna (Russia). Measurements have covered Q range from 7×10^{-3} to 0.4 \AA^{-1} . The SANS measurements of these aqueous solutions of non-ionic surfactant / sugars have shown that the micelles are formed. From the measured dependence of the scattered intensity on the scattering angle, we derived the size, shape of micelles, aggregation number at various compositions and temperatures. Experimental results were processed using the PCG Software 2.0 (Austria).

Transport and thermodynamic properties of quantum spin liquids*V. R. Shaginyan**Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre
“Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia*

We analyze optical conductivity of the herbertsmithite. Our analysis is in agreement with the corresponding measurements [1], which provide important experimental evidence of the nature of quantum spin liquid (QSL) composed of spinons. Our theoretical consideration of the optical conductivity allows us to reveal the physical mechanisms responsible for its temperature and magnetic field dependences. We show that at elevated temperatures the low-frequency optical conductivity is a decreasing function of T . This observation is consistent with the experimental data [1]. We also demonstrate that the optical conductivity diminishes under the application of magnetic fields. This observation seems to contradict the experimental results since no systematic magnetic field dependence is observed [1]. To elucidate the magnetic field dependence, we note that the measurements of the optical conductivity have been taken at 6 K and the magnetic fields $B=7$ T [1]. In such a case the system is still in the transition regime and the magnetic field dependence cannot be observed [2, 3, 4]. We predict that the B -dependence of optical conductivity can be observed at $B=7$ T provided that T is less or equal to 1 K. Thus, we predict that the optical conductivity diminishes at growing magnetic fields. Since the contribution coming from phonons does not depend on magnetic fields, we suggest that measurements under the application of different magnetic fields. In our report we expose a state of the art in the investigations of physical properties of 2D geometrically quantum frustrated magnets. As QSL excitations are fermions, the most appropriate description of observed phenomena is based on some spinon formalism. Our analysis permits to describe the multitude of experimental results obtained in measurements on frustrated magnets including inelastic neutron scattering.

1. D.V. Pilon, C.H. Lui, T.-H. Han, D. Shrekenhamer, A.J. Frenzel, W.J. Padilla, Y.S. Lee, and N. Gedik, *Phys. Rev. Lett.* 111, 127401 (2013).
2. V.R. Shaginyan, M.Ya. Amusia, A.Z. Msezane, and K.G. Popov, *Phys. Rep.* 492, 31 (2010).
3. M.Ya. Amusia, K.G. Popov, V.R. Shaginyan, and V.A. Stephanovich, *Theory of Heavy-Fermion Compounds*, Springer Series in Solid-State Sciences 182 (2014).
4. V.R. Shaginyan, V.A. Stephanovich, A.Z. Msezane, P. Schuck, J.W. Clark, M. Ya. Amusia, G.S. Japaridze, K.G. Popov, and E.V. Kirichenko, *J. Low Temp. Phys.* 189, 410 (2017).

Momentum distribution of nickel and niobium in the Ni₄₄Nb₅₆ metallic glass by neutron Compton scattering: isotopic substitution in action

G. Syrykh¹, M. Krzystyniak^{2, 3}, A. Stolyarov⁴, G. Romanelli²

¹ National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

² ISIS Facility, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, Didcot, Oxfordshire, United Kingdom

³ School of Science and Technology, Nottingham Trent University, Clifton Campus, Nottingham, United Kingdom

⁴ Institute for Nuclear Research RAS, Moscow, Russia

Drawing from our proven track record of Neutron Compton scattering (NCS) work performed on VESUVIO spectrometer at ISIS, we carried out experiments for the two samples with same chemical composition (Ni₄₄Nb₅₆) but with different Ni isotopes [⁵⁸Ni (cross section = 26.1 barn) and ⁶⁰Ni (cross section = 0.99 barn)]. By measuring the nuclear momentum distributions of Ni and Nb nuclei we traced the changes to $g_M(\omega)$ (M=Ni, Nb). To aid the data analysis the widely used technique of stoichiometric fixing was applied. Namely, the ratio of peak intensities, A_{Ni} / A_{Nb} , where A_{Ni} and A_{Nb} are the fitted scattering intensities from the Ni and Nb atoms, were fixed to $N_{Ni}b_{Ni}^2 / N_{Nb}b_{Nb}^2$, where N_{Ni} and N_{Nb} are the corresponding numbers of atoms in the beam. The total scattering cross-section for nickel is $\sigma_{Ni} = 4\pi b_{Ni}^2$, where b_{Ni} is the neutron–proton scattering length, with a similar expression for σ_{Nb} . Since neutron–nucleus cross-sections for both nickel isotopes have different values the fitted values of the constants A_M were different, what permitted us to calculate partial kinetic energies of Ni and Nb atoms. In order to obtain $g_M(\omega)$ in Ni₄₄Nb₅₆ system the Schommers algorithm was used. Obtained results were compared with existing inelastic neutron scattering data and computer simulation. As the result we obtained much deeper insight into the interatomic bonding interaction and atomic dynamics in the metallic disordered systems.

1. P. Lamparter, W. Sperl, S. Steeb J. and Blétry .Z. Naturforsch. 37A, 1223-1234 (1982).
2. E.Sváb, Gy.Mészáros, G.Konczos, S.N.Ishmaev, S.L.Isakov, I.P.Sadikov, A.A.Chernyshov: Journal of Non-Crystalline Solids, vol.104, Issues 2-3, September 1988, pp. 291-299.
3. G.F. Syrykh, S.N.Ishmaev, P.I. Soldatov: Journal of Non-Crystalline Solids, vol. 192–193, 2 December 1995, pp. 282-285.
4. Г.Ф.СЫРЫХ*, И.Л.САШИН, М.Г.ЗЕМЛЯНОВ*, С.Н.ИШМАЕВ*: Reports of JINR (Dubna, Russia), № P14-97-402.
5. J.-B. Suck, H. Rudin, in "Glassy Metals II" ed. H. Beck, H.-J. Guntherodt, Topic in Applied Phys. 53 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1983.
6. C. Andreani et al., Advances in Physics, 66, 1, (2017).
7. D.K.Belashenko and G.F.Syrykh: Inorganic Materials, vol.40, №5 (2004), pp. 483-4
8. Romanelli, G and M Krzystyniak, Nucl Instrum Meth A 819, 84-88 (2016).
9. Krzystyniak, M, Druzicki K, and Fernandez-Alonso F, Phys Chem Chem Phys, 17, 31287-31296 (2015)
10. Syrykh, G. F. et al., JETP LETTERS, 105, 591 (2017).
11. M. Krzystyniak et al., Phys. Rev. B, 83, 134305 (2011)
12. M. Krzystyniak et al., J. Chem. Phys., 133, 4505 (2010)

Фазовые переходы в синтетических фотонных кристаллах

С. С. Агафонов¹, Г. А. Емельченко², В. П. Филоненко³, М. Н. Шушунов¹

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

² Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

³ Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия

Синтетические фотонные кристаллы представляют собой упорядоченные упаковки сфер кремнезёма с диаметром 300 – 1000 нм, получаемые методом седиментации из растворов. Внутри каждой сферы они обладают неупорядоченной (аморфной) структурой в соответствии с различными полиморфными модификациями кремнезёма. На нейтронограммах исходных образцов, полученных на дифрактометре «ДИСК», выявляются дифракционные гало, сопоставление положений которых с положениями дифракционных пиков для различных модификаций кремнезёма показывает, что они соответствуют сильнейшим дифракционным линиям высокотемпературной модификации кремнезёма – β -кристобалиту.

При повышении температуры до 1500°C опалы становятся прозрачными, гало на нейтронограммах обостряются, свидетельствуя об образовании кристобалитного стекла. В то же время согласно данным малоугловой дифракции исчезают пики «сверхрешетки», свидетельствуя об исчезновении дальнего порядка на уровне глобул - при сохранении ближнего на межатомном уровне, т.е. о плавлении сверхрешетки.

При давлении 7 ГПа с повышением температуры до 300°C по данным нейтронной дифракции образуется смесь аморфного и кристаллического коэсита, а с дальнейшим повышением температуры до 500°C возникает однофазный кристаллический коэсит. При повышении давления до 11 ГПа происходит кристаллизация: из аморфного кристобалита образуется кристаллический стишовит, как и в случае коэсита. Отличие по сравнению с образованием стишовита из кристаллического кремнезёма, в том, что область существования стишовита расширяется, а не сужается с ростом температуры так, что при понижении температуры возникает смесь коэсита и стишовита.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-02-00755.

Электрические и гальваномагнитные эффекты в гетеро эпитаксиальных структурах $\text{InAs}_{0,57}\text{Sb}_{0,43}$ и $\text{InAs}_{0,62}\text{Sb}_{0,38}$

Х. В. Алигулиева, Н. А. Аллахвердиев, А. Ф. Талыфлы

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

Исследовались электрические и гальваномагнитные эффекты в гетероэпитаксиальных структурах $\text{InAs}_{0,57}\text{Sb}_{0,43}$ и $\text{InAs}_{0,62}\text{Sb}_{0,38}$ в широкой области температур 0,5-300 К и в магнитных полях вплоть до 8 Тл. В указанных структурах измерялись электропроводность эффекта Холла и магнитосопротивления.

Показано, что концентрация носителей заряда, определенная из осцилляций Шубникова – де Гааза, хорошо согласуется с концентрацией, вычисленной из данных измерений эффекта Холла.

1. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., 89, 5815 (2001).
2. Z.M. Fang, K.Y. Ma, D.H. Jaw, R.M. Cohen, G.B. Stringfellow. J. Appl. Phys., 67, 7034 (1990).
3. M.Y. Yen, R. People, K.W. Wecht, A.Y. Cho. Appl. Phys. Lett., 52, 489 (1988).
4. S.P. Svensson, W.L. Sarney, H. Hier, Y. Lin, D. Wang, D. Donetsky, L. Shterengas, G. Kipshidze, G.L. Belenky. Phys. Rev. B, 86, 245205 (2012).
5. E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, M.L. Green, D. Brasen, A.R. Kortan, J. Michel, Y.J. Mii, B.E. Weir. Appl. Phys. Lett., 59, 811 (1991).
6. J. Tersoff. Appl. Phys. Lett., 62, 693 (1993).
7. G.L. Belenky, D. Donetsky, G. Kipshidze, D. Wang, L. Shterengas, W.L. Sarney, S.P. Svensson. Appl. Phys. Lett., 99, 141116 (2011).
8. M. Razeghi. Eur. Phys. J. Appl. Phys., 23, 149 (2003).
9. D.E. Aspnes, A.A. Studna. Phys. Rev. B, 27, 985 (1983). [10] Y.B. Li, S.S. Dosandj, I.T. Ferguson, A.G. Norman, A.G. de Oliveyra, R.A. Stradling, R. Zallen. Semicond. Sci. Technol., 7, 567 (1992).

Особенности кристаллической и магнитной структуры сложных оксидов железа под высоким давлением

*Н. М. Белозерова¹, С. Е. Кичанов¹, Д. П. Козленко¹, Е. В. Лукин¹,
S. S. Atta-Allah², Б. Н. Савенко¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Ядерный исследовательский центр, АЕАЕ, Каир, Египет*

Изучение ферритов со структурой шпинели имеет большое значение как для фундаментальных исследований, так и с точки зрения потенциальных приложений, благодаря их интересным структурным и магнитным свойствам [1]. Большое разнообразие магнитных свойств, проявляемых такими ферритами, определяется особенностями распределения ионов железа между различными кристаллографическими участками в кристаллической структуре шпинели. Одной из важных частей современных исследований ферритов шпинельного типа Zn-Cu является синтез сложных ферритов с контролируемым перераспределением ионов железа между участками А и В, что приводит к изменению магнитных свойств ферритов [2, 3].

Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры ферритов шпинельного типа, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в исследуемых соединениях [3].

В настоящей работе, ферриты со структурой шпинели исследовались методом нейтронной дифракции в диапазоне температур 300 - 425 К и при высоком давлении до 4.7 ГПа. Все эксперименты проводились на дифрактометре для исследования микрообразцов ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна, Россия) с использованием камеры высокого давления с сапфировыми наковальнями.

С увеличением давления и температуры наблюдалось резкое уменьшение магнитных моментов ионов железа расположенных в разных кристаллографических позициях А и В. Обнаруженный эффект свидетельствует о наличии перехода из первоначального ферримагнитного состояния в парамагнитное. Параметры элементарной ячейки, межатомные расстояния и углы, магнитные моменты ионов железа, находящихся в кристаллографических узлах А и В, были рассчитаны и представлены в данной работе как функции давления и температуры. Структурные механизмы магнитного фазового перехода в ферритах со структурой шпинели обсуждаются.

1. R. Valenzuela, JMMM. 307, 191-197 (2011).

2. S.M. Yunus, Y.-S. Shim, C.-H. Lee, JMMM. 232, 121-132 (2001).

3. S.S. Ata-Allah, A. Hashhash, A. Moreo, JMMM. 307, 191-197 (2006).

Алгоритм SPEVA как инструмент анализа эволюции нейтронных дифрактограмм, полученных в экспериментах реального времени

В. Б. Злоказов¹, И. А. Бобриков¹, А. М. Балагуров^{1, 2}

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

В докладе описан алгоритм, анализирующий последовательность нейтронных дифрактограмм в экспериментах, проводимых в реальном времени (*real-time, in-situ*). Эти дифрактограммы снимаются с поликристаллического (в общем случае многофазного) образца, который подвергался непрерывно или скачкообразно внешнему воздействию (тепловому, механическому и т.д.) и тем самым содержат информацию о последовательной эволюции структурных характеристик этого образца в определенные моменты времени в зависимости от этих воздействий. Математическая задача формулируется как анализ временной эволюции регрессионной модели случайного нестационарного процесса, сильно нелинейного по параметрам.

Анализируется эволюция двух возможных описаний рефлексов образца:

- 1) как структурных факторов (методом Ритвельда);
- 2) или как площадей пиков, соответствующих этим рефлексам (методами фиттирования пиков).

Для программной реализации алгоритма такого анализа в программу VMRIA, предназначенной для выполнения самого широкого класса методов обработки экспериментальных данных регрессионного типа, был вставлен class SPEVA (spectrum evolution analysis). В докладе обсуждаются различные аспекты проблем, возникающих при обработке вводимой последовательности дифрактограмм. Приведены примеры применения данного алгоритма при изучении с помощью нейтронной дифракции реального времени температурно-зависимых структурных фазовых переходов в сплаве Fe-27Ga [1], а также структурных изменений в электродных материалах литий-ионного аккумулятора в процессе его заряда разряда [2].

1. A.M. Balagurov, I.S. Golovin, I.A. Bobrikov, V.V. Palacheva, S.V. Sumnikov, V.B. Zlokazov., J. Appl. Cryst. 50, 198 (2017)

2. I.A. Bobrikov, N.Yu. Samoylova, S.V. Sumnikov, O.Yu. Ivanshina, R.N. Vasin, A.I. Beskrovnyi, A.M. Balagurov., J. Power Sources, 372, 74 (2017)

Фазовые превращения в фуллерене C₇₀: аморфной фазе и исходном кристаллическом

*М. С. Блантер¹, П. А. Борисова², В. В. Бражкин³,
А. Г. Ляпин³, В. П. Филоненко³*

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

² *МИРЭА - Российский технологический университет, Москва, Россия*

³ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

Были исследованы фазовые превращения аморфной фазы фуллерена C₇₀ при высоких температурах (ВТ) (до 1100°C) и высоких давлениях (ВД) (2–8 ГПа), проведено сравнение с известными превращениями кристаллического фуллерена C₇₀. Аморфная фаза была получена размолотом в шаровой мельнице. Исследование проводилось методами дифракции нейтронов, рамановской спектроскопии и ПЭМ высокого разрешения. Измерения проводили после синтеза образцов ex-situ. Было показано, что под действием ВТВД аморфная фаза фуллерена C₇₀ сохраняет аморфную структуру вплоть до 500°C тогда как в дифракционном спектре кристаллической фазы C₇₀ при 200–500°C появляются известные максимумы, вызванные полимеризацией. При температурах 800–1100°C аморфная и кристаллическая (полимеризованная) фаза превращается в разупорядоченный графит или нанокристаллический графит. С повышением температуры и давления степень кристалличности увеличивается. Интересным различием в превращении аморфной фазы и кристаллического фуллерена C₇₀ является различие в структуре образующегося аморфного графита, что видно на нейтронных дифрактограммах и картинах ПЭМ ВР - в присутствии или отсутствии нанокластеров графита размером 2–5 нм, состоящих из изогнутых монослоев графита. Обнаружена сильная анизотропия аморфного графита, образовавшегося в квазиизотропных условиях из фуллерена, проявляющаяся в четкой зависимости дифрактограмм от положения синтезированного образца относительно направления нейтронного пучка в процессе измерения. Наблюдаются два типа нейтронограмм разупорядоченного графита с уширенными графитовыми пиками: «нормальная», в которой наиболее интенсивным является рефлекс (002), и «аномальная», в которой самым интенсивным является размытый пик графита на месте рефлекса графита (110) и (112). Структура и степень анизотропности разупорядоченного графита зависит от типа фуллереновой фазы, из которой этот графит образован. Введение небольших количеств дейтерия (~2 ат.%) в исходную фуллереновую фазу существенно изменяет рамановский спектр, наноструктуру и анизотропию образующегося разупорядоченного графита.

Работа выполнена с использованием уникального научного оборудования «НИК на базе реактора ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт». М. С. Блантер и П. А. Борисова благодарят РФФИ (проект № 16-02-00193а), П.А.Борисова благодарит РНФ (проект № 16-12-10065, нейтронные исследование, обсуждение результатов) и В. В. Бражкин (эксперименты с аморфным фуллереном при высоких давлениях; обсуждение результатов) благодарит РНФ (проект № 14-22-00093) за финансовую поддержку настоящего исследования.

Кристалл-дифракционный метод ультрапрецизионной нейтронной спектроскопии. Анализ влияния стабильности температуры и вибраций

*Ю. П. Брагинец^{1, 2}, Ю. В. Борисов¹, В. В. Воронин^{1, 2, 3}, И. А. Кузнецов¹,
М. В. Ласица^{1, 2}, С. Ю. Семенухин^{1, 2}, В. В. Федоров^{1, 2, 3}*

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

² *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

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

Нейтрон, участвуя во всех известных на сегодняшний день типах взаимодействий, является очень удобным объектом исследований. Изучение его свойств дает ключ к пониманию как структуры «элементарных» частиц и механизма их взаимодействий, так и процессов, происходящих в масштабах Вселенной. Например, поиск электрического заряда нейтрона может быть проверкой некоторых теоретических концепций за пределами Стандартной Модели, в частности, моделей, предполагающих наличие нарушения бозон-лептонной ($B-L$) симметрии [1] или моделей, основанных на предположении о существовании дополнительных пространственных измерений [2].

Одним из вариантов реализации эксперимента по измерению электрического заряда нейтрона является метод, основанный на использовании явления спиновой интерферометрии и эффекта двухкристальной фокусировки при дифракции по Лауэ [3,4]. Для увеличения точности измерения заряда нейтрона необходимо разнести кристаллы на значительное расстояние друг от друга (~1 м). Это является сложной задачей, поскольку установка становится очень чувствительна к малейшим внешним воздействиям (температура, вибрация и др.).

Для определения степени влияния этих воздействий проведены температурные испытания с комбинированной (активной и пассивной) тепловой защитой. Показано, что в условиях реакторного зала с колебаниями температуры в несколько градусов, экспериментальная установка обеспечивает стабильность температуры на кристаллах не хуже 0.01 К, при этом стабильность разницы температур между двумя кристаллами ~ 0.005 К.

Измерение уровня вибрации в секторе пучка холодных нейтронов PF1b реактора ИЛЛ (Гренобль, Франция) дало величину скорости смещения кристаллов относительно друг друга на уровне ~ 10^{-3} см/с.

Проведенный анализ демонстрирует, что угловое разрешение установки, без учета влияния совершенства реальных образцов кристалла, может находиться на уровне 10^{-3} от брэгговской ширины отражения, что составляет ~0.001 угловой секунды.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (№ 3.3838.2017/4.6).

1. R. Foot, H. Lew and R.R. Volkas, J. Phys. G. 19, 361 (1993)

2. В. А. Рубаков, УФН 171, 913938 (2001)

3. В.Л. Инденбом, И.Ш. Слободецкий, К. Г. Труни, ЖЭТФ 66, 1111 (1974)

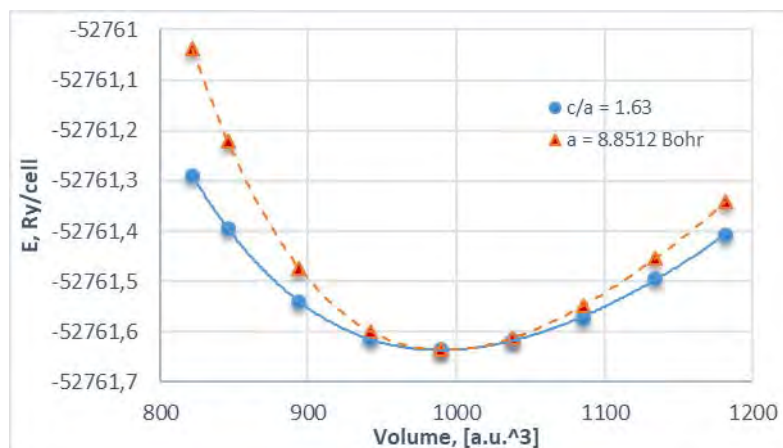
4. V.V. Voronin, L.A. Akselrod, V.N. Zabenkin, I.A. Kuznetsov. Physics Procedia 42, 25-30 (2013)

Квантово-механические расчеты энергии образования, структурных и магнитных свойств C14 Лавес - фазы Fe₂Mo

А. Л. Удовский, Д. А. Васильев

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

Принимая во внимание тетрагональную симметрию Лавес – фазы (λ) со структурой C14 химического соединения Fe₂Mo применили разработанную в [1] новую методику расчета энергии связи, давление и модулей упругости в зависимости от двух аргументов («а» и отношения $\eta=c/a$, где а и с – параметры решетки λ - фазы) с использованием пакета квантово- механических расчетов WIEN2k. Проведены расчеты энергий связи ферромагнитной Лавес – фазы Fe₂Mo со структурой C14, и ферромагнитных (ФМ) ОЦК и C14 – фаз Fe и парамагнитных ОЦК и C14 – фаз Mo в согласии с результатами [2]. Учет магнетизма позволил получить отрицательную величину энтальпии образования C14 – фазы Fe₂Mo в качественном согласии с экспериментальными данными. Учет магнетизма позволил рассчитать энтальпию образования $\Delta H_f(\text{Fe}_2\text{Mo}) < 0$ для основного состояния ФМ λ – фазы Fe₂Mo относительно ФМ ОЦК Fe и ПМ ОЦК Mo, что соответствует термодинамической стабильности ФМ λ – фазы Fe₂Mo в согласии с фазовой диаграммой системы Fe-Mo в отличие от результатов работы [3], в которой получено $\Delta H_f(\text{Fe}_2\text{Mo}) > 0$, что противоречит экспериментальным данным.



Полная энергия C14 Лавес – фазы Fe₂Mo в зависимости от объема, рассчитанные по разным направлениям: при фиксированном отношении $c/a = 1.63$ (кружочки), и при фиксированном параметре $a = 8.8512$ (Bohr) (треугольники)

Исследования были поддержаны грантом ОХНМ Президиума РАН III.5.2.Работа выполнялась по государственному заданию №007-00129-18-00.

1. А.Л. Удовский. Развитие квантово-механического подхода для расчетов энергий связи и модулей упругости σ - и C14 Лавес - фаз в системах Fe-(Cr,V,Mo,W). Тезисы XII симпозиума «ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ», 21-27 мая 2018г. Санкт-Петербург.
2. M. Sluter. Ab initio lattice stabilities of some elemental complex structures. CALPHAD 30 (2006) 357–366
3. J. Pavlu, M. Sob. Ab initio Study of C14 Laves phases in Fe-based systems. J. Min. Metall. Sect. B –Metall. 48 (3) B (2012) 395-401.

Исследования электрохимических интерфейсов с помощью нейтронного времяпролетного рефлектометра “ГРЭИНС” реактора ИБР-2

*И. В. Гапон^{1, 2}, В. И. Петренко^{1, 3}, А. А. Рулёв⁴, Е. Е. Ушакова^{4, 5},
Л. В. Яшина⁴, Д. М. Иткис^{4, 5}, М. В. Авдеев¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт проблем безопасности атомных электростанций НАН Украины, Чернобыль, Украина

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

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

⁵ ООО «Инжиниринговый инкубатор», Дубна, Россия

Системы электрохимической конверсии и хранения энергии играют сегодня важную роль в производительности широкого спектра устройств: от портативных телефонов, ноутбуков и электроинструментов до крупных объектов, включая системы топливных элементов питания, железнодорожные локомотивы, установки выравнивания электросетей и т.д. Работа большинства систем, таких как суперконденсаторы или перезаряжаемые батареи, основана на электрохимических интерфейсах. Эволюция структуры границ раздела между электродами и электролитами влияет на все функциональные параметры устройств, что побуждает исследователей изучать химические процессы на самих интерфейсах и явления переноса в приграничных слоях непосредственно в условиях функционирования. Нейтронная рефлектометрия (НР) является одним из немногих методов, чувствительных к скрытым интерфейсам, благодаря высокой проникающей способности тепловых нейтронов. Также важной особенностью НР является возможность изменения контраста между электродом и электролитом посредством изотопного замещения водород-дейтерий в жидком компоненте для лучшего разрешения представляющих интерес приповерхностных слоев.

На рефлектометре «ГРЭИНС» реактора ИБР-2, предназначенного для исследований с жидкостными границами раздела, разработаны и апробированы специализированные экспериментальные ячейки для изучения структурных изменений на электрохимических интерфейсах в процессе их функционирования [1]. Ячейки предназначены для проведения экспериментов с безводными органическими электролитами, которые используются сегодня во всех литиево-ионных батареях и большинстве суперконденсаторов. На основе анализа экспериментальных кривых отражения рассмотрена чувствительность метода нейтронной рефлектометрии к образованию межфазного слоя (SEI) на поверхности металлического электрода.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №17-12-01540).

1. Катаев Э.Ю., Гапон И.В., Иткис Д.М., Белова А.И., Авдеев М.В., Патент РФ 2654317 (2018)

Электронное обеспечение рефлектометра поляризованных нейтронов

*Т. И. Глушкова, М. В. Дьячков, М. Р. Колхидашвили, Т. В. Савельева,
В. А. Соловей, А. А. Сумбатьян, В. Г. Сыромятников, В. А. Ульянов*

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

В НИЦ КИ «ПИЯФ» для управления рефлектометром поляризованных нейтронов (РПН) успешно разработана и реализована система автоматизации с использованием современных технологий в области электронного обеспечения.

Электронное обеспечение связывает оборудование узлов РПН с компьютером для управления пользователем системой РПН с помощью программного обеспечения, что позволяет осуществить следующие действия:

- установку параметров работы устройств и их изменение в процессе выполнения поставленной задачи;
- управление шаговыми двигателями и абсолютными датчиками угла поворота для перемещения оборудования по осям движения в нужном направлении;
- получение экспериментальных данных в виде графической и цифровой информации, их сохранение для последующей обработки;
- контроль и управление магнитным полем узла образца;
- управление радиочастотными адиабатическими флипперами;
- управление вакуумной системой;
- проведение анализа поляризации нейтронов;
- регистрацию нейтронов.

В процессе проведения измерений большинству узлов рефлектометра требуется юстировка, поэтому узлы размещены на специальных юстировочных устройствах, обеспечивающих линейные и поворотные перемещения с помощью шаговых двигателей и абсолютных датчиков.

Электронные устройства, с помощью которых осуществляется управление движением и взаимодействие с оборудованием, включают в себя разработанные в ПИЯФ: контроллер с SSI-интерфейсом RA153.27 и драйвер шаговых двигателей RA153.20, драйвер флиппера PNPI RA131.06, блок реверса RA153.16, устройство PCI-Carrier card RI437.03.01.01+RI437.03.06.01. Кроме того, используются фирменные изделия: контроллеры-драйверы Trinamic TMC2100, плата цифрового ввода-вывода PIO-D48, многопортовые преобразователи MOXA.

*Авторы благодарят Л. А. Аксельрода, А. П. Булкина, С. И. Калинина, Е. Н. Медведева,
Н. К. Плешанова, С. И. Хахалина, Г. Е. Шмелева.*

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства
образования и науки Российской Федерации, соглашение №14.607.21.0194 от 26.09.2017г.,
RFMEFI60717X0194.*

Золь-гель синтез биметаллических наночастиц Pt/Pd в кремнеземной матрице

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

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

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

³ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия*

В последние годы проявляется большой интерес к изучению структуры биметаллических Pt/Pd наночастиц, их физических и химических свойств, в том числе в свете создания нового поколения топливных элементов. Свойства биметаллических наночастиц определяются их размерами и структурой, и могут заметно отличаться от свойств, составляющих их металлов. Различные методы синтеза позволяют получать наночастицы с различным строением: ядро-оболочка [1], частицы с единой кристаллической решеткой [2-3], или смесь Pt и Pd частиц.

Целью данного исследования было определение типа строения наночастиц Pt/Pd и их кристаллической структуры, равномерно распределенных в кремнеземной матрице, получаемых золь-гель методом. В ходе работы были синтезированы: кремнезоль с наночастицами Pt, кремнезоль с наночастицами Pd, также приготовлена смесь из этих зольей путем механического перетирания сухих ксерогелей; и золь, в состав которого входили прекурсоры Pt и Pd в мольном соотношении 1:1. После созревания все золи высушивались и термофиксировались в течение 30 мин при температуре $T = 250^\circ\text{C}$.

Платина и палладий имеют кристаллические ГЦК решетки с близкими параметрами (для Pt $a = 3,92 \text{ \AA}$, а для Pd $a = 3,89 \text{ \AA}$), а проведенное ранее исследование показало [4], что из-за малого размера наночастиц уширение дифракционных максимумов довольно большое, это затрудняет разделение близкорасположенных пиков. Поэтому, чтобы однозначно определить образуются ли в ходе золь-гель синтеза наночастицы с единой кристаллической решеткой или возникает смесь наночастиц отдельных металлов, мы измеряли количество и положение дифракционных максимумов на больших углах рассеяния, где их расхождение составляет величину $\Delta 2\theta \sim 1.8^\circ$. Измерения производились на рентгеновском дифрактометрическом комплексе Rigaku SmartLab (CuK α , 9kW, Гатчина, НИЦ КИ ПИЯФ).

Участки дифрактограмм, полученные в ходе исследования, приведены на рис. 1. Рассеяние на золе, полученном из механической смеси двух ксерогелей, дало картину с двумя дифракционными максимумами. Их положение совпадает с положением пиков, полученных для зольей, содержащих только наночастицы Pt ($2\theta = 122,7^\circ$) или Pd ($2\theta = 124,7^\circ$). Для золя, в состав которого входили соединения обоих металлов, наблюдается только один дифракционный

максимум при угле рассеяния $2\theta = 123,9^\circ$. Это свидетельствует о том, что наночастицы в данном образце состоят из кристаллитов с общей атомарной Pt/Pd решеткой. На рентгенограмме (рис. 2), полученной для данного золя присутствуют дифракционные максимумы, соответствующие плоскостям либо со всеми четными, либо со всеми нечетными индексами. Таким образом, Pt и Pd образуют твердый раствор замещения с общей ГЦК решеткой.

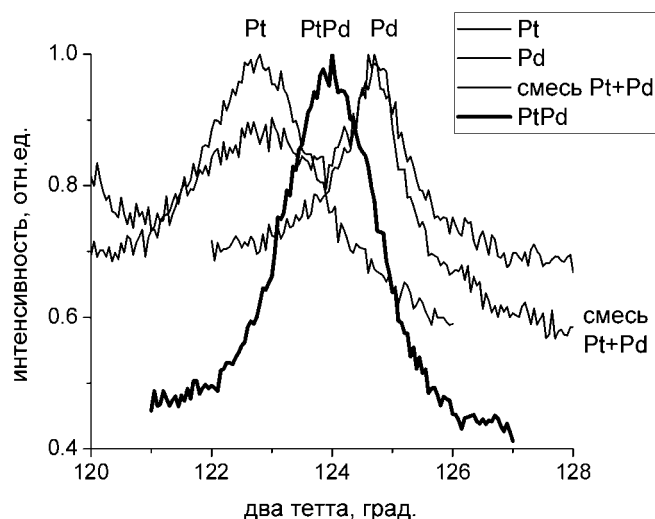


Рис. 1. Фрагменты дифрактограмм золь с наночастицами Pt или Pd, смеси золь Pt и Pd, и золя состава Pt/Pd.

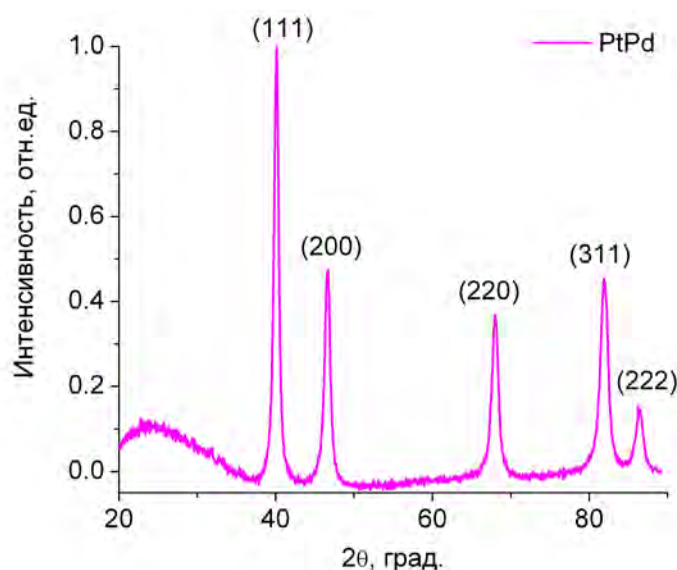


Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма золя с наночастицами Pt/Pd.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-03-01201 А.

1. N.V. Long, T. Asaka, T. Matsubara, M. Nogami. Shape-controlled synthesis of Pt–Pd core–shell nanoparticles exhibiting polyhedral morphologies by modified polyol method // Acta Materialia 59 (2011) 2901–2907
2. Raub E., Woerwag G. Die Gold-Platin Palladium Legierungen // Zeitschrift fuer Metallkunde, 1955, 46, 513-515.
3. Raub E. Metals and alloys of the platinum group. Journal of the Less-Common Metals, 1959, 1, 3-18.
4. О. А. Шилова, Н. Н. Губанова, А. Г. Иванова, М. Ю. Арсентьев, В. А. Уклеев // Состав и структура тонких композиционных платиносодержащих пленок, полученных из кремнезоль // Журнал неорганической химии, №5, Т.62, 2017, с.650-657.

Кристаллические структуры барий-стронциевых ниобатов

С. Г. Джабаров^{1, 2}, Р. З. Мехдиева², Д. П. Козленко¹, А. И. Маммадов²,
С. Е. Кичанов¹, Н. Т. Dang³, Б. Н. Савенко¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

³ Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam

В представленной работе проведены детальные исследования влияния распределения ионов натрия в четырехугольных и пятиугольных кристаллографических позициях на кристаллическую структуру и вибрационные спектры твердых растворов $(1-x)\text{Ba}_{1.65}\text{Sr}_{3.35}\text{Nb}_{10}\text{O}_{30} - x\text{Ba}_4\text{Na}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ методами нейтронной дифракции и Рамановской спектроскопии.

Для синтеза соединений в качестве исходных реагентов были использованы карбонаты и окислы высокой чистоты: BaCO_3 , Na_2CO_3 , Nb_2O_5 , и SrCO_3 . Расчетные количества компонентов взвешивались на весах ВЛП-200 с точностью до 0.05%. Смешивание и помол проводили в присутствии этилового спирта в агатовых барабанах с халцедоновыми шарами на вибромельнице. Синтезированные при температурах 1373-1523 К в течении 6-12 h. материалы дробились, измельчались и перетирались в присутствии этилового спирта, а в дальнейшем сушились и гомогенизировались. Однородность шихты и степень дисперсности частиц контролировалось методами оптической микроскопии. Из высушенных порошков прессовались диски размерами 1.2×12 mm, которые в дальнейшем спекались при температурах 1523-1623 К при удельном давлении 400-500 kg/cm².

Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на спектрометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна). Дифракционные спектры измерялись при угле рассеяния $2\theta = 90^\circ$. Характерное время измерения одного спектра – 20 min. Анализ дифракционных данных производился методом Ритвельда с помощью программ MR1A и FullProf.

Спектры рамоновского рассеяния света измерялись на спектрометре LabRam (NeHe лазер с длиной волны 632 nm, конфокальная щель 110 μm и $\times 50$ объектив).

Предполагается, что при достижении уровня $x \sim 0.5$ BNN натрий полностью заполняет вакансии в четырехугольных позициях и начинается заполнение пятиугольных позиций, которые преимущественно заполнены ионами бария Ba^{2+} . Этот факт подтверждают зависимости длин связи Sr(Na)-O от концентрации натрия: при уровне содержания BNN $x < 0.5$ наблюдается заметное анизотропное изменение четырехугольного кислородного окружения, а при $x > 0.5$ нет сильного влияния на длины связи Sr(Na)-O.

Электронное и программное обеспечение тестового времяпролетного измерителя нейтронных спектров

*М. В. Дьячков, В. А. Соловей, М. Р. Колхидашвили, Т. И. Глушкова,
В. А. Ульянов, А. П. Булкин, В. А. Матвеев*

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

Основной задачей тестового измерителя спектров является определение спектральных характеристик нейтронного пучка, формируемого на месте образца рефлектометра поляризованных нейтронов (РПН) реактора ИР-8. Дополнительной задачей является получение спектральных картограмм нейтронных пучков на выходах нейтронных труб ИР-8.

Для выполнения поставленных задач разработана электронная система, которая позволяет измерять время пролета нейтронов и управлять точными пространственными положениями диска прерывателя, диафрагмы и He^3 детектора с помощью шаговых двигателей и контроллеров.

Управление всеми процессами осуществляется с помощью компьютера через USB интерфейс. Для автоматизации управления работой электронных узлов и для получения нейтронных спектров используется специальная программа Chopper, разработанная в среде LabWindows CVI.

Электроника для измерения времени пролета нейтронов включает следующие разработанные в ПИЯФ устройства:

- предусилитель с высоковольтным фильтром;
- двухканальный усилитель RV165.13;
- многоканальный время-цифровой преобразователь со встроенным многоканальным анализатором и интерфейсом USB – RV161.15;
- высоковольтный источник питания детектора RV422.38K1-3U;
- источник питания электроники RV422.34;
- устройство генерации стартовых сигналов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, Соглашение №14.607.21.0194 от 26 сентября 2017г., RFMEFI60717X0194.

Авторы благодарят С. И. Калинина, Е. Н. Медведева, С. И. Хахалина.

Аэрогели на основе Al_2O_3 , модифицированные 8-оксихинолином

Х. Э. Ёров¹, А. Е. Баранчиков², В. К. Иванов^{1, 2}, С. А. Лермонтов³

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

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

³ Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, Россия

Аэрогели (АГ) – это особый тип твердофазных материалов с открытой пористой структурой, которая образована посредством последовательного соединения наночастиц или полимерных молекул. Благодаря такой структуре АГ имеют высокую пористость, низкую плотность, и высокую удельную площадь поверхности и, зачастую прозрачность в видимом диапазоне. Значительный интерес вызывает возможность получения АГ, сочетающих в себе указанные характеристики с люминесцентными свойствами. В качестве такого материала могут выступить металлоксидные аэрогели, модифицированных координационными соединениями металлов.

Целью настоящей работы является разработка методов получения аэрогелей на основе Al_2O_3 , модифицированного 8-оксихинолином.

Лиогели Al_2O_3 были синтезированы золь-гель методом с применением в качестве гелирующего агента оксида пропилена. В качестве прекурсора был использован $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$. Модификация 8-оксихинолином (НҚ) была проведена путем добавления НҚ в процессе формирования геля Al_2O_3 . Было показано, что количество добавляемого НҚ существенно влияет на продолжительность формирования геля (до 5 сут при мольном соотношении НҚ:Al = 0,15). Полученные гели промывали путем замены растворителя. Отработана методика промывки лиогелей, обеспечивающая достижение концентрации НҚ в промывной жидкости не выше 10^{-5} М. Синтез аэрогелей был осуществлен путем сверхкритической сушки в CO_2 . Все полученные аэрогели являлись рентгеноаморфными и показали высокую удельную площадь поверхности ($S_{уд} \sim 500$ м²/г) и высокую пористость. Аэрогели Al_2O_3 , модифицированные НҚ, показали интенсивную люминесценцию с максимумом $\lambda = 561$ нм при длине волны возбуждения $\lambda_{ex} = 300$ нм.

Таким образом, в работе впервые получены аэрогели на основе Al_2O_3 , модифицированного 8-оксихинолином, которые характеризуются высокой удельной площадью поверхности в сочетании с интенсивной люминесценцией ($\lambda = 561$ нм).

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (грант 14-13-01150).

1. Kh E. Yorov, A. D. Yapryntsev, A. E. Baranchikov, T. V. Khamova, E. A. Straumal, S. A. Lermontov, and V. K. Ivanov. Journal of Sol-Gel Science and Technology, 86(2):400–409, 2018.

Исследование сверхпроводящих и ферромагнитных слоистых наногетероструктур V/FeV/Nb и Nb/CuNi методом времяпролетной рефлектометрии поляризованных нейтронов

В. Д. Жакетов, Ю. В. Никитенко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Магнитные свойства сверхпроводников и ферромагнетиков антагонистичны. Магнитное поле свободно проникает в ферромагнетик, в то время, как сверхпроводник его выталкивает (эффект Мейснера). Это связано с тем, что ферромагнетизм стремится выстроить спины электронов параллельно, в то время, как сверхпроводимость обусловлена антипараллельным упорядочением спинов (куперовские пары). Но тем не менее сосуществование сверхпроводимости и ферромагнетизма в одном объеме реализовать возможно. Например, в слоистой наногетероструктуре [1-3]. Актуальным методом исследования подобных структур является рефлектометрия поляризованных нейтронов. Методика позволяет получить магнитный и ядерный профили по глубине структуры, а незеркальное рассеяние и малоугловое рассеяние в скользящей геометрии (GISANS) позволяют обнаружить в структуре различные неоднородности в большом диапазоне характерных размеров 1 нм – 100 мкм. В этой работе мы исследовали слоистые структуры типа V/FeV/Nb и Nb/CuNi [4-6]. Магнитные и сверхпроводящие свойства были исследованы посредством СКВИД магнитометрии. Зависимости магнитного момента от температуры, измеренные в различных режимах (ZFC и FC), показали присутствие суперпарамагнитного поведения, а также парамагнитного эффекта Мейснера. В нейтронных измерениях, нами исследовалось рассеяние нейтронов из когерентного канала отражения и преломления. Таким образом нами был развит метод рассеяния нейтронов в скользящей геометрии в реальном масштабе времени на времяпролётном рефлектометре. Релаксационные зависимости сечения рассеяния для структуры V(150nm)/FeV(19nm)/Nb(150nm), полученные в диапазоне магнитных полей 25 Э – 10 кЭ показали, что характерные времена релаксации различны для температуры выше и ниже T_c сверхпроводящих слоев Nb(6.8 K) и V(4 K). В сильно коррелированных электронных системах часто наблюдается релаксационное поведение. Такое поведение может быть обусловлено, например, сверхпроводящими вихрями и ферромагнитными доменами, для этих случаев характерны релаксационные времена порядка нескольких минут и часов [7, 8].

1. P.W. Anderson and H. Suhl, Phys. Rev. 116, 898 (1959).
2. L.N. Bulaevskii, A. I. Buzdin, Zh. Eksp. Teor Fiz 94, 256 (1988).
3. F.S. Bergeret, K.B. Efetov, A. I. Larkin, Phys. Rev. B 62, 11872 (2000).
4. V.D. Zhaketov, Yu.V. Nikitenko, A.V. Petrenko et al. // JETP 152 p.565-580 (2017).
5. V.D. Zhaketov, Yu.V. Nikitenko, F. Radu et al. // JETP 151, num. 1, pp. 132-150, 2017.
6. V.D. Zhaketov, A.V. Petrenko, S.N. Vdovichev et al. Magnetic state resumption in the ferromagnetic-superconducting heterostructure. // Submitted to JETP, 2018.
7. D.K. Lottis, R.M. White, and E. dan Dahlberg, Phys. Rev. Lett. 67, 362 (1991).
8. R.D. Kirby, J.X. Shen, R.J. Hardy, and D.J. Sellmyer, Phys. Rev. B 49, 10810 (1994).

**Индукцированная пептидом агрегация инсулина:
малоугловое рассеяние нейтронов**

Я. А. Забродская^{1, 2}, Д. В. Лебедев¹, А. Г. Александров², А. И. Куклин³,
В. В. Егоров^{1, 2}

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

² НИИ гриппа им. А. А. Смородиной Минздрава России, Санкт-Петербург, Россия

³ Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Диабет I типа (инсулин зависимый) является широко распространённым заболеванием. Модулирование активности инсулина представляется собой актуальную проблему в свете необходимости хранения и транспортировки белка для введения больным. В настоящее время для стабилизации растворимой формы инсулина применяют целый ряд химических соединений, предотвращающих агрегацию и фибрилlogenез инсулина.

Целью данной работы являлся поиск пептидов, способных к специфическому взаимодействию с инсулином и способных модулировать его активность. Анализ первичной структуры клеточных и белковых партнёров инсулина позволил предложить последовательность пептида, потенциально способного взаимодействовать с белком (*Elf*).

В предварительных экспериментах при помощи светорассеяния было показано, что пептид *Elf* индуцирует олигомеризацию инсулина в растворе. Структура олигомеров была охарактеризована при помощи малоуглового рассеяния нейтронов. Показано, что пептид *Elf* способен к образованию супрамолекулярных комплексов, взаимодействующих с мономерами инсулина. В экспериментах на животных (крысы) при внутримышечном введении препарата по изменению уровня глюкозы в крови было установлено, что в составе олигомеров, образовавшихся под действием пептида, активность инсулина снижается. Специфичность обнаруженного взаимодействия была показана при использовании контрольного пептида, содержащего неспецифические структурные элементы пептида *Elf* (полигистидиновый тэг).

С использованием метода поверхностного плазмонного резонанса, флуориметрии и моделирования молекулярной динамики в настоящее время осуществляется картирование сайтов связывания инсулина и пептида *Elf*. Проводится изучение кинетических параметров высвобождения инсулина из полученных комплексов для оценки возможности применения пептида *Elf* для разработки устойчивой к хранению пролонгированной формы препарата.

Модернизация методики изготовления свободных от остаточных напряжений d0-образцов в нейтронной стресс-дифрактометрии*И. Д. Карпов, Н. Н. Исакова, А. И. Калюканов**Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Учёт и контроль внутренних напряжений при изготовлении и в процессе эксплуатации массивных металлических деталей остаётся неотъемлемой частью цикла их производства и дальнейшего тех. обслуживания. Информация о изменении внутренних напряжений в процессе службы детали позволяет не только прогнозировать время её выхода из строя и своевременно производить ремонт или замену, но и оптимизировать само производство.

Среди всех существующих на данный момент неразрушающих методов, метод нейтронной дифракции обладает важным преимуществом – это единственный метод, позволяющий проводить прямые измерения всех трёх компонент деформаций в глубине объёмных кристаллических образцов и, соответственно, проводить вычисления пространственного распределения напряжений внутри деталей. Сама методика основана на сравнении межплоскостных расстояний кристаллического образца в напряжённом и ненапряжённом состояниях. Измерение разности этих межплоскостных расстояний необходимо проводить с высокой точностью, т.к. даже небольшое изменение значений одного из параметров вызывает существенные изменения результирующего значения деформации. Поэтому изготовлению находящегося в ненапряжённом состоянии образца (d0-образца) должно быть уделено особое внимание.

Чаще всего d0-образец получают из самого образца вырезая из него тонкую пластинку. Затем для снятия напряжений её отжигают, а если это невозможно (например, из-за фазовых переходов в материале образца или возможного перераспределения имеющихся фаз), делают на пластинке поперечные надрезы, получая «гребёнку». Однако, как показывают исследования, в таких d0-образцах всё ещё могут сохраняться остаточные напряжения, наличие которых оказывает влияние на измеряемое межплоскостное расстояние.

В процессе работы по модернизации методики изготовления d0-образцов, снижения уровня остаточных напряжений удалось добиться введением дополнительных поперечных надрезов на каждом зубчике «гребёнки». Вся резка производилась электроэрозионным способом, толщина реза составляла около 0,2 мм. Эксперименты по оценке влияния самих надрезов, попадающих в измеряемый объём образца, на результаты эксперимента показали, что этот эффект укладывается в ошибку измерения положения дифракционного пика. Тем не менее предпочтительнее наносить надрезы таким образом, чтобы максимально избегать попадания пустот в область рассеяния нейтронов.

Модернизация нейтронного дифрактометра МОНД

А. И. Калюканов, Н. Н. Исакова, Н. Ф. Мирон

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Монокристалльный нейтронный дифрактометр МОНД это пяти-кружный автоматизированный прибор для исследования структуры монокристалльных образцов различных веществ, а также для изучения динамических эффектов, возникающих при дифракции нейтронов на совершенных кристаллах в зависимости от толщины кристалла. Изменение толщины достигалось наклоном образца, для чего была вена пятая ось – наклон кольца. Изготовление дифрактометра МОНД шло поэтапно. В начале был изготовлен гониометр (1982 г.), а гониостат был изготовлен и смонтирован только в 1986 году. В этом же году была завершена и автоматизация, которая включала программное управление всеми осями, контролируемое угловыми датчиками. Эксплуатация дифрактометра в такой комплектации продолжалась до 2008 года, когда стала очевидна необходимость модернизации, которая включала полную замену двигателей, угловых датчиков и программного обеспечения. Все эти годы на установке МОНД выполнялись эксперименты по динамическим эффектам. Необходимость очередной модернизации настала, когда появились задачи по структурному исследованию монокристаллических образцов. Стала очевидна необходимость увеличения скорости перемещения по всем степеням свободы. Для этого МОНД на этом этапе был оснащен мощными шаговыми двигателями, новыми контроллерами и новыми мощными источниками питания. Это позволило более чем в семь раз увеличить скорость перемещения по всем осям и повысить точность позиционирования. Система регистрации нейтронов была оснащена двумя новыми взаимозаменяемыми детекторами: сцинтилляционный десятипозиционный и позиционно – чувствительный детектор (ПЧД) mar345dtb. Этот детектор дает существенные преимущества при исследовании биологических объектов, высокомолекулярных соединений и неорганических объектов с большими значениями параметров кристаллической ячейки. Для конфигурирования в комплекс дифрактометра МОНД потребовались существенные изменения, как в программной, так и в аппаратной части. Была изготовлена новая унифицированная, многофункциональная подставка для размещения детекторов, обеспечивающая возможность их оперативной смены (10-позиционный сцинтилляционный детектор \Leftrightarrow позиционно – чувствительный детектор mar345dtb) без нарушения юстировочных настроек. Модернизирована системы вывода нейтронного пучка на базе двойного монохроматора с переменной длиной волны. Диапазон доступных длин волн составляет $0.8 \div 2.4 \text{ \AA}$.

Исследование остаточных напряжений в тонкостенных деталях из сплава Ti-6Al-4V, полученных методом прямого лазерного выращивания

И. Д. Карпов¹, В. Т. Эм¹, С. А. Рылов¹, Е. В. Земляков², С. Ю. Иванов²

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

² *Институт лазерных и сварных технологий, Санкт-Петербург, Россия*

Аддитивные технологии, или технологии послойного синтеза, позволяют значительно уменьшить время изготовления и стоимость тонкостенных крупногабаритных деталей по сравнению с традиционными технологиями изготовления путем фрезерной обработки или сварки. Особенно это касается тонкостенных деталей для авиационной промышленности из сплава Ti-6Al-4V, который плохо обрабатывается и сравнительно дорог. Одной из проблем металлических деталей, полученных с помощью аддитивных технологий, является наличие в них больших остаточных напряжений, которые могут сильно повлиять на их прочностные характеристики и исказить геометрические параметры. В некоторых случаях они приводят к отрыву детали от подложки, на которой она выращивается.

В данной работе представлены результаты исследования остаточных напряжений в модельных пластинах разной толщины из сплава Ti-6Al-4V, полученных методом прямого лазерного выращивания на толстой (жесткой) подложке из того же сплава. Измерения проводились на нейтронном дифрактометре СТРЕСС, установленном на реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт». В настоящее время нейтронный метод является единственным неразрушающим методом измерения напряжений в массивных образцах.

Показано, что измеренное поле напряжений хорошо согласуется с полем напряжений, рассчитанным методом конечных элементов. Максимальные растягивающие напряжения образуются на краях пластины вблизи подложки и направлены они перпендикулярно подложке вдоль направления выращивания. С приближением к середине пластины вблизи подложки эти растягивающие напряжения уменьшаются и переходят в сжимающие.

Показано, что распределение напряжений в середине образца по высоте кардинально отличается от распределений напряжений, полученных другими авторами [1-2] в аналогичных пластинах сплава Ti-6Al-4V, выращенных на тонкой (не жесткой) подложке, которая деформируется в процессе выращивания.

1. B.A. Szost, S. Terzi et.al, Materials and Design, 89, 559 (2016).

2. V. Luzin, N. Hoyo, Mater. Res. Proc. 2, 497 (2016).

Определение нейтронно-физических характеристик водяного и полиэтиленового замедлителей нейтронов в составе мишенной сборки компактного источника нейтронов DARIA

*Н. А. Коваленко¹, К. А. Павлов^{1, 2}, П. И. Коник^{1, 2}, А. О. Петрова^{1, 2}
Е. Е. Рувинская^{1, 2}, Г. Д. Довженко^{1, 2}, В. В. Тарнавич¹*

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

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

Компактный источник нейтронов DARIA проектируется на основе ускорителя протонов с энергией до 13 МэВ и бериллиевой мишени. Выбор бериллия в качестве мишени позволяет получить по реакции ${}^9\text{Be}(p,n)$ 1 нейтрон на 1000 протонов, попавших в мишень [1]. Согласно проведенным расчетам, средняя энергия нейтронов в спектре, испускаемом бериллиевой мишенью, составляет ~ 2 МэВ, что согласуется с данными представленными в работе [2]. Для детального изучения конденсированных сред необходимо предварительно замедлить нейтроны до энергий эВ-диапазоны (что соответствует длинам волн 2-20 ангстрем). Выбор материалов, формы и комбинации замедлителей выполняется под конкретную задачу. В данной работе изучались особенности использования полиэтиленового и водяного замедлителя для получения «тепловых» и «холодных» (энергия ниже 0,025 эВ).

Расчеты проводились с помощью кодов, использующих метод Монте-Карло. В работе приведены сравнительные физические характеристики для замедлителей из следующих материалов: вода, полиэтилен, метан. Были получены спектры нейтронов на выходе из водяного, полиэтиленового и метанового замедлителей. Построены зависимости спектра нейтронов от температуры замедлителей. В соответствии с расчетами, оптимальным является использование полиэтилена или воды для получения теплового источника нейтронов. Выбраны оптимальные геометрические характеристика данных замедлителей и их размещение относительно Be-мишени.

1. U. Rücker, T. Cronert, J. Voigt, J.P. Dabruck, P.-E. Doege, J. Ulrich, R. Nabbi, Y. Beßler, M. Butzek, M. Büscher, C. Lange, M. Klaus, T. Gutberlet, T. Brückel. The Jülich High Brilliance Neutron Source Project. (2013).
2. W. B. Howard, S.M. Grimes, J. C. Yanch. Measurement of the Thick Target Be(p,n) Neutron Energy Spectra (2009).

Развитие методов моделирования структуры многослойных липидных везикул по данным малоуглового рассеяния

П. В. Конарев^{1, 2}, А.Ю. Грузинов³, Д.И.Свергун³

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

³ Европейская молекулярная биологическая лаборатория, Гамбург, Германия

Исследования структуры фосфолипидов, образующих в растворе многослойные липидные везикулы (липосомы), представляют большой интерес для понимания структурной организации и механизмов функционирования биологических мембран. Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние являются эффективными методами исследования структуры биомакромолекул в растворе [1]. Они позволяют определять форму и размеры везикул, оценивать число слоев и степень полидисперсности везикулярной системы, толщину липидного бислоя, и моделировать электронные плотности гидрофильной и гидрофобной областей бислоя. Методы анализа данных, однако, обычно ограничиваются рассмотрением системы с одним типом везикулярных частиц.

Нами была разработана программа LIPMIX для оценки структурных параметров липидных везикул при наличии разных типов частиц в растворе, которые могут отличаться числом слоев, распределением плотности в бислое, размерами и полидисперсностью частиц. Программа была протестирована на модельной системе из многослойных везикул на основе дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ) на различных этапах процесса экструзии через пористую мембрану. По результатам моделирования малоугловых рентгеновских данных от ДПФХ, определены профили электронной плотности липидного бислоя везикул, размеры и степень полидисперсности везикулярной системы. Рассчитанное распределение электронной плотности бислоя хорошо совпадает с профилем, который получен прямым расчетом из экспериментальных данных с помощью Фурье-преобразования. Показано, что в нативном состоянии в растворе присутствуют везикулы, содержащие около 20-25 липидных слоев, тогда как в процессе экструзии доля многослойных везикул резко сокращается, и в растворе остаются везикулы с количеством слоев не более 4-5. При этом средние размеры липосом соответствуют 50-55 нм (внешний радиус частиц) со степенью полидисперсности около 20%.

Полученные результаты демонстрируют высокую эффективность разработанного алгоритма для исследования структурного состава фосфолипидных систем.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Федерального агентства научных организаций (соглашение № 007-ГЗ/ЧЗ363/26).

1. Svergun D.I., Koch M.H.J., Timmins P.A., May R.P. Small angle X-ray and neutron scattering from solutions of biological macromolecules. Oxford University Press, 2013, 358 стр.

Мембраны на выходе нейтронных пучков реактора ПИК*К. А. Коноплев**Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Горизонтальные экспериментальные каналы (ГЭК) из тяжеловодного отражателя выходят в центральный зал реактора. Сформированные каналами нейтронные пучки представляют основную продукцию реактора. Внутри ГЭК находится атмосферный воздух, содержащий 1,292% по массе Аргона, главным образом (99%) аргона 40. Тепловое сечение реакции $^{40}\text{Ar}(n,\gamma)^{41}\text{Ar} \approx 0,6$ барн и резонансный интеграл ≈ 35 мбарн. Образующийся аргон 41 имеет период полураспада 109,6мин и распадается с энергией гамма-кванта 1,3 Мэв и бета-частиц с максимальной энергией 1,18 Мэв. Беспрепятственный выход аргона в центральный зал создает гамма-фон и дозовую нагрузку на персонал. Кроме того, необходимо рассматривать последствия аварии на канале с возможностью выхода тяжелой воды в зал. Тяжелая вода содержит 2 Ки трития на литр. Испарения этой воды повышают дозовую нагрузку в центральном зале выше допустимой.

Рассматриваются оба режима; нормальная работа и авария.

К проблеме надмолекулярной организации бактериальной целлюлозы *Gluconacetobacter xylinus*

Р. Ю. Смыслов^{1,2}, Г. П. Коница^{2, 3}, К. В. Ездакова², А. К. Хрипунов¹,
А. А. Ткаченко⁴, V. Pipich⁵

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 им. И. В. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

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

В последние годы обилие публикаций по бактериальной целлюлозе *Gluconacetobacter xylinus* (ЦГХ) связано с уникальностью ее надмолекулярной организацией (НМО) структуры, что делает ЦГХ перспективной для применения во многих областях техники. В тоже время, правильность схемы НМО структуры ЦГХ, предложенной Brown'ом [1] и в последствии плодотворно развитой Fink'ом [2], остается до сих пор не до конца подтвержденной.

В настоящей работе, структура нативной нано-гель пленки (НГП) ЦГХ была исследована методом УМУРН в диапазоне $1.5 \cdot 10^{-4} < q < 2 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$. Анализ данных показал наличие двух структурных уровней для нативной НГП бактериальной целлюлозы. Кроме того, при $q_{\max} \cong 1.24 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ на кривой рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ наблюдается структурный пик, который явно указывает на присутствие в НГП ближнего порядка с радиусом структурных корреляций $\xi = 2\pi/q_{\max} \approx 500 \text{ нм}$.

1-й структурный уровень ЦГХ – это ламели. У них прямоугольное сечение с толщиной $Rg_1 \approx 12 \text{ нм}$ и шириной $R_c \approx 140 \text{ нм}$, полученной из ширины пика на кривой $d\Sigma(q)/d\Omega$ на его полувывсоте. Ламели, таким образом, и формируют этот ближний порядок, являющийся границей 1-го и 2-го структурных уровней. В области малых q , на 2-м структурном уровне, наблюдается степенная зависимость $d\Sigma(q)/d\Omega$ с $n_2 \approx 1.95$. Т.е. речь идет об объемной фрактальной структуре, которую образуют ламели с длиной $L > 1 \text{ мкм}$.

Согласно [1], синтезируемые микрофибриллы имеют размер $(6 \div 10) \cdot (6 \div 10) \text{ нм}^2$ и укладываются в наноленты с поперечным сечением $(6 \div 10) \cdot (30 \div 150) \text{ нм}^2$ и $L \gg 1 \text{ мкм}$. Используя фрактальное представление о геометрическом самоподобии НМО структуры в определенном диапазоне размеров, мы раздвинули рамки этой модели, показав, что на мезоскопическом уровне НМО структуры ЦГХ представляет собой фрактальную сеть с дисперсионным элементом – узлом ячейки сети размера $R_c \approx 140 \text{ нм}$. Этот структурный элемент образует ближний порядок с $\xi \approx 500 \text{ нм}$, создавая ячейку сети. Такая ячейка имеет размер 500 нм нижней границы фрактального диапазона на 2-м структурном уровне. Верхняя граница самоподобия объемного фрактала с размерностью $D_V = n_2$ составляет $\geq 3 \text{ мкм}$. Сушка на воздухе НГП БЦ приводит к утрате указанных выше особенностей НМО структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант № 16-02-00987).

1. R. M. Brown, Jr., J. Macromol. Sci. A. 33, 1345–73 (1996).

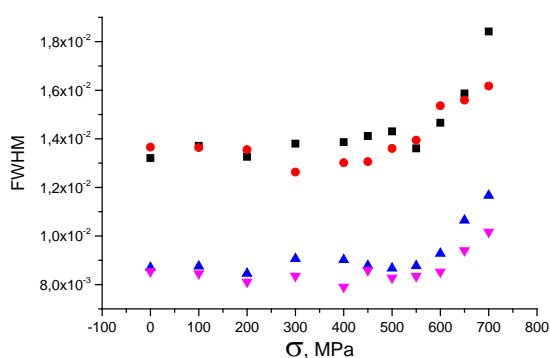
2. H.-P. Fink, H. J. Purz, A. Bohn, and J. Kunze, Macromol. Symp. 120, 207–217 (1997).

Изучение механических свойств аустенитной стали 12Х18Н10Т при различных режимах внешней нагрузки

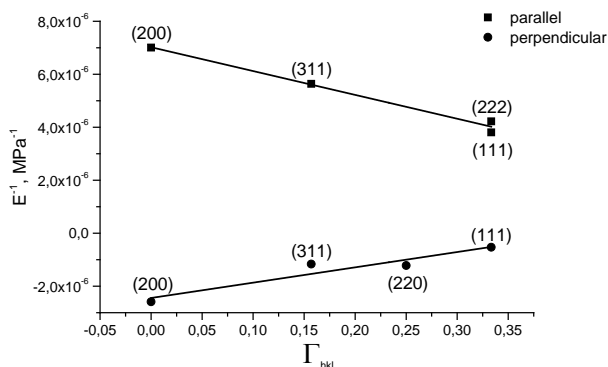
А. А. Круглов, Г. Д. Бокучава, И. В. Папушкин

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

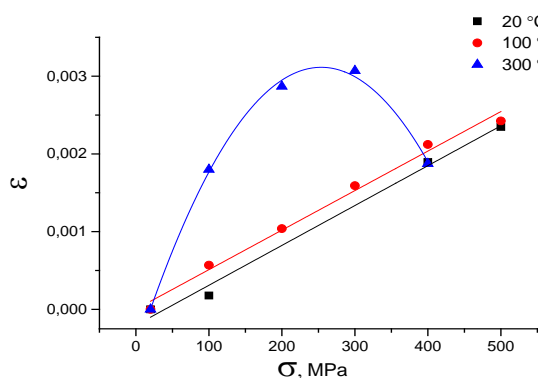
Аустенитные нержавеющие стали широко используются благодаря их высокой коррозионной стойкости и вязкости. Влияние внешней нагрузки на механические свойства данных материалов представляет большой интерес для различных практических применений. На фурье-дифрактометре высокого разрешения ФСД на реакторе ИБР-2 изучено поведение аустенитной стали 12Х18Н10Т в различных режимах приложения внешней нагрузки. В ходе экспериментов изучалась деформация кристаллической решетки материала при нагрузках до 700 МПа, в том числе при повышении температуры до 300 °С. Кроме того, исследовано поведение материала при различной степени усталости вследствие циклической пластической деформации, а также динамика формирования мартенситной фазы при различных степенях усталости.



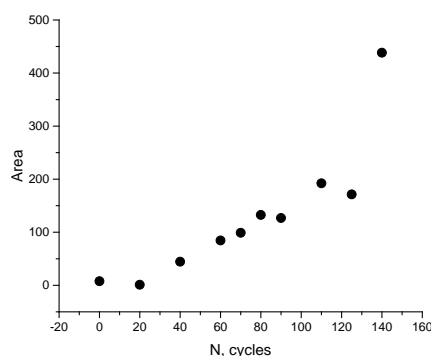
а)



б)



а)



б)

а) Изменение ширины дифракционных пиков при увеличении нагрузки. б) Упругие модули в зависимости от коэффициента анизотропии. в) Относительная деформация в зависимости от нагрузки при разной температуре. г) Интенсивность дифракционного пика (110) мартенситной фазы при циклировании.

Исследование характеристик нейтронного пучка 1-го канала реактора ИБР-2

В. Л. Кузнецов^{1,2}, Е. В. Кузнецова¹, П. В. Седышев², А. П. Сиротин²

¹ Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Выполнены исследования временных характеристик времяпролетного спектрометра, установленного на 1 – ом канале реактора ИБР-2. Обнаружено изменение времени вспышки реактора относительно старта. Измерено время замедления нейтронов в зависимости от длины волны нейтрона. Установлена зависимость полуширины рефлексов от длины волны нейтрона. Сделана оценка мозаичности монокристалла.

Авторы выражают глубокую благодарность В. Н. Швецову, Е. В. Лычагину, Ю. Н. Копачу, М. И. Цулая, В. В. Новицкому, Э. А. Коптелову (ЛНИ ИЯИ РАН) за полезные обсуждения и поддержку работы.

1. K.F. Graham and J.M. Carpenter, Nuclear Science and Engineering, **49**, 416-437 (1972)
2. Уинздор К. Рассеяние нейтронов от импульсных источников. М. Энергоатомиздат, 1985.
V.N. Shvetsov, S.V. Alpatov, N.V. Astakhova et al., Instruments and Experimental Techniques, 55, N 5, (2012).
3. Ю.А. Александров, Э.И. Шарапов, Л. Чер, Дифракционные методы в нейтронной физике. М.: Энергоиздат, (1981).

Измерения времени жизни нейтрона методом времени пролета

Е. В. Кузнецова¹, В. Л. Кузнецов^{1,2}, П. В. Седышев²

¹ Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Точное определение времени жизни нейтрона очень важно для физики частиц и астрофизики [1, 2]. Известны два типа экспериментов измерения времени жизни нейтронов: первые из них – пучковые [3,4], другие – эксперименты по хранению УХН в материальных и магнитных ловушках [5-8].

Средневзвешенное значение времени жизни нейтрона, измеренное пучковым методом и методом хранения УХН в материальных ловушках, включенное в рассмотрение PDG 2013, отличаются и расхождение составило 3.8σ .

Предложен новый метод измерения времени жизни нейтрона, основанный на изменении спектра нейтронов за время их пролета достаточно большой пролетной базы, за счет их распада. Метод интересен тем, что в нем используются относительные измерения, которые уменьшают систематические погрешности. С помощью моделирования эксперимента были проведены исследования влияния на экспериментальные результаты неодинаковой эффективности детекторов, влияния присутствия фона и взаимодействия нейтронов с остаточным газом, которое можно измерить экспериментально. Было найдено, что в данном методе важно проводить измерения спектров нейтронов одновременно на двух времяпролетных базах, а калибровку детекторов – на одной и той же пролетной базе. Для измерения времени жизни нейтрона с точностью 2 секунды необходимо зарегистрировать не менее $6 \cdot 10^{16}$ нейтронов, что, в принципе, возможно на современных импульсных источниках нейтронов.

В заключении авторы выражают благодарность В. Н. Швецову, Е. В. Лычагину, Ю. Н. Копачу, Ш. С. Зейналову, А. Ю. Музычко, В. В. Новицкому, А. Б. Попову и др. сотрудникам ЛНФ ОИЯИ, а также Э. А. Коптелову, Н. М. Соболевскому и др. сотрудникам ЛНИ ИЯИ РАН за поддержку в работе.

1. D. Dubbers, M. Schmidt, Rev. Mod. Phys. 83, P. 1111(2011).
2. А.П. Серебров, УФН, Т. 175, №9, С. 905(2005).
3. J.S. Nico, M.S. Dewey, et al., Phys. Rev. C. 71, P. 055502-01(2005).
4. A.T. Yue, et al., Phys. Rev. Lett. B. 111, P. 1(2013).
5. S. Arzumanov, L. Bondarenko, et al., Phys. Lett. B. 745, P.79(2015).
6. А.П. Серебров, Э.А. Коломенский и др., Письма в ЖЭТФ, Т. 106, №10, С.599 (2017).
7. R. W. Pattie Jr., N. B. Callahan, et al, (in collaboration), arXiv: 1707.01817 (2017).
8. V.F. Ezhov, A.Z. Andreev, et al., arXiv: 1412.7434(2014).

Строение комплексов детонационных наноалмазов с поливинилпирролидоном

*Ю. В. Кульвелис¹, В. Т. Лебедев¹, А. Е. Алексенский², Е. Б. Юдина²,
А. В. Швидченко², А. Т. Дидейкин², А. Я. Вуль²*

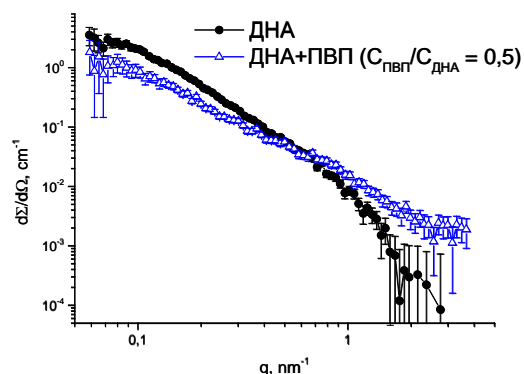
¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

Детонационные наноалмазы (ДНА) являются перспективными материалами для биомедицинского применения. Частицы ДНА размерами 4-5 нм с функциональными группами на поверхности образуют стабильные коллоиды в воде за счет образования двойного электрического слоя вокруг частиц, препятствующего их агрегации. Благодаря химической инертности алмазного ядра и нетоксичности ДНА рассматриваются в качестве носителей лекарственных веществ. Однако в водно-солевой изотонической среде частицы ДНА слипаются и выпадают в осадок, что требует дополнительной стабилизации для использования их в биологических целях.

Поливинилпирролидон (ПВП), известный как медицинский полимер, входящий в состав многих лекарственных средств, является хорошим стабилизирующим агентом для частиц ДНА в водно-солевых условиях. Адсорбция ПВП на поверхности частиц ДНА при простом смешивании растворов компонентов достаточна для обеспечения стабильности в физиологических условиях в течение длительного времени. Сочетание биосовместимого полимера ПВП и инертной алмазной основы позволит использовать полученный комплекс ДНА-ПВП в качестве эффективного носителя для многих лекарственных веществ в биологических опытах и в перспективе при использовании в медицине [1].

Комплексы ДНА-ПВП исследованы методом малоуглового рассеяния нейтронов с вариацией контраста среды (в легкой и тяжелой воде). Анализ кривых рассеяния и восстановленных корреляционных функций показал формирование пористых кластеров размерами 30-40 нм, собранных из отдельных частиц ДНА, и позволил оценить распределение молекул ПВП, сорбированных на поверхности частиц ДНА и заполняющих поры кластера.



Малоугловое рассеяние на ДНА и комплексе ДНА-ПВП в D₂O.

Работа поддержана грантом РФФ 14-13-00795.

Ускорения холодных нейтронов в идеальном кристалле вблизи брэгговского резонанса

М. В. Ласица^{1, 2}, *В. В. Федоров*^{1, 2, 3}, *В. В. Воронин*^{1, 2, 3}, *Ю. П. Брагинец*^{1, 2},
Я. А. Бердников^{1, 2}, *И. А. Кузнецов*¹, *С. Ю. Семенухин*^{1, 2}, *Е. О. Вежлев*^{1, 2}

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

² *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

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

Показано, что вблизи брэгговского отражения холодных и тепловых нейтронов наблюдается эффект резонансного поведения потенциала взаимодействия нейтрона с совершенным кристаллом. Данное поведение определяется отклонением от условия Брэгга на величину масштаба брэгговской ширины. В нашем случае величина размаха резонанса составила ~40нэВ.

В эксперименте, проведенном лабораторией рентгеновской и гамма спектроскопии НИЦ КИ - ПИЯФ на реакторе ВВР-М был обнаружен новый эффект нейтронной оптики: эффект ускорения нейтрона. Данный эффект использует резонансный характер поведения показателя преломления. Нейтрон влетал в кристалл вблизи условия Брэгга. За время его пролета через кристалл варьировалось отклонение от условия Брэгга посредством изменения относительной скорости нейтрона и кристалла. Изменение относительной скорости было получено гармоничными колебаниями кристалла вдоль направления распространения пучка нейтронов. Таким образом, удалось заработать разность потенциалов взаимодействия нейтрона с кристаллом на входе и выходе из него, что дало привело к изменению энергии нейтрона на величину до 5нэВ.

Авторы выражают благодарность персоналу реактора ВВР-М (ПИЯФ, Гатчина). Настоящая работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (программа 3.329.2014/К).

1. В.В. Воронин, В.В. Федоров, и др. Эффект ускорения холодных нейтронов в кристалле, Ядерная физика, 80(1) (2017) 39-47

2. Yu.P. Braginetz, et al., Crystal acceleration effect for cold neutrons in vicinity of Bragg resonance, Physica B: Physics of Condensed Matter (2017), <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.11.061>

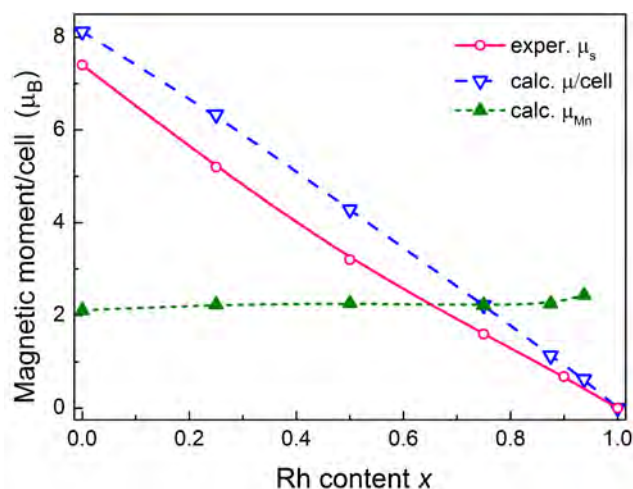
Первопринципное исследование расчеты электронных и магнитных свойств системы $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ (B20)

М. В. Магницкая¹, Н. М. Щелкачев^{1, 2}, А. В. Цвященко¹

¹ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия*

На основе первопринципных расчетов электронной структуры изучалось поведение электронных и магнитных свойств соединений $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ ($0 \leq x \leq 1$) с нецентросимметричной структурой B20 при изменении концентрации x . При $x = 0, 0.125, 0.25, 0.5, 0.75, 0.875, 0.9375, 1$ рассчитаны электронная структура и поверхность Ферми в парамагнитном (ПМ) и ферромагнитном (ФМ) состоянии. В электронном спектре ПМ MnGe ($x = 0$), при энергии E на 0.5 эВ выше уровня Ферми E_F имеется щель, обусловленная симметрией B20. С ростом x положение щели понижается, и в RhGe ($x = 1$) она расположена при $E = E_F - 0.75$ эВ. При этом MnGe и RhGe являются металлами. При половинном составе $x = 0.5$ щель (непрямая) попадает непосредственно на уровень Ферми, и соединение $\text{Mn}_{0.5}\text{Rh}_{0.5}\text{Ge}$ оказывается близким к полупроводнику. При переходе в магнитное состояние $\text{Mn}_{0.5}\text{Rh}_{0.5}\text{Ge}$ также становится металлом. Эти результаты качественно согласуются с измерениями транспортных свойств. Показано, что намагниченность $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ сосредоточена в основном на атомах Mn и пропорциональна их количеству. Локальный магнитный момент $\mu_{\text{Mn}} \sim 2 \mu_B$ незначительно возрастает с ростом x . Расчеты магнитных свойств хорошо согласуются с экспериментальными измерениями.



Расчетный и экспериментальный магнитный момент на элементарную ячейку как функция концентрации родия x . Сплошные треугольники – момент на атоме марганца.

Работа поддержана программами РАН и РФФИ (№№ 16-02-01122, 17-02-00725).

Определение среднестатистических положений атомов в структуре корунда из данных нейтрон-дифракционного эксперимента на сильно фрагментированных кристаллах $Al_2O_{3-\delta}$

*Е. Н. Максимова¹, В. И. Максимов¹, А. Н. Пирогов¹, Р. М. Абашев^{2, 3},
А. И. Сюрдо^{2, 3}, В. И. Соколов¹*

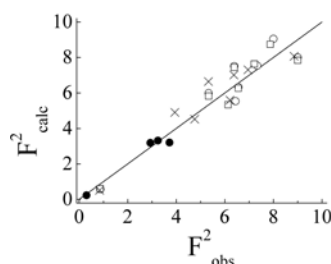
¹ *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Уральский федеральный университет им. первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

³ *Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Кристаллы сапфира $Al_2O_{3-\delta}$ ($\delta \sim 0.001$), применяемые в дозиметрах рентгеновского и γ -излучения, представляют практический и научный интерес. Для изучения реальной структуры названных объектов были выращены методом Степанова два образца-монокристалла с анионным дефицитом 10^{17} см^{-3} (радиационно-чувствительный) и менее чем 10^{12} см^{-3} (отожжённый в атмосфере кислорода, не чувствительный к радиации). На этих кристаллах проведено нейтронографическое исследование (дифрактометр Д7б, реактор ИВВ-2М, г.Заречный). В обоих случаях, при существенной фрагментированности образцов (дифракционные отражения от самого крупного блока и от микрокристаллов накладываются [1]), подтверждено соответствие структуре корунда и определены параметры её решётки, координаты атомов. Результаты измерений обработаны в пакете FullProf.

На данных от кристалла с меньшим недостатком по кислороду проведено три обработки: 1) без коррекции на интенсивность от микрокристаллов, 2) при коррекции измеренной интенсивности через данные кривых отражения, 3) коррекции интенсивности с учётом поля зрения счётчика дифрактометра. Наилучшие решения, численно идентичные для трёх указанных случаев, даёт модель «совершенного кристалла». Полученный результат верифицирован для структуры с анионным дефицитом 10^{17} см^{-3} (разностная кривая на рисунке).



Разностная кривая: \circ , \square , \times - для структуры с недостатком по аниону $<10^{12} \text{ см}^{-3}$ в коррекции 1, 2, 3 соответственно, и \bullet - для структуры с анионным дефицитом 10^{17} см^{-3} .

Работа выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания ФАНО России по теме «Поток» № АААА-А18-118020190112-8 и проекту №18-10-2-22 Программы УрО РАН.

1. V I Maksimov, V I Sokolov, et al., IOP Conf. Series: Material Science and Engineering 169, 012017 (2017).

Исследование фазовые равновесия и нестехиометрии в пленках системы $\text{Cu}_2\text{Se} - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3$ *А. Ч. Мамедова¹, Н. К. Керимова²*¹ *Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*² *Азербайджанский государственный экономический университет, Баку, Азербайджан*

Процессы образования фаз и фазовых переходов в нанотолщинных пленках системы $\text{Cu}_2\text{Se} - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3$ исследованы электронографическим методом. Установлены условия образования и фазовые равновесия распределенных на плоскости конденсации самостоятельных фаз в виде тройных соединений $\text{CuGa}_5(\text{In}_5)\text{Se}_8$ и твердых растворов составов $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)_5\text{Se}_8$ с различным соотношением компонентов. Методом кинематической электронографии установлено, что в результате рекристаллизации поликристаллических пленок происходит α - β превращение тройного соединения состава CuIn_5Se_8 . На основе электронографического анализа пленок построена схема распределения фаз, образующихся вследствие одновременного испарения двойных соединений на подложках монокристаллических NaCl , расположенных друг от друга на расстоянии 5 мм, при общей длине 200 мм. При одновременном, и послойном осаждении Cu_2Se , Ga_2Se_3 и In_2Se_3 независимо от порядка напыления выделяющиеся соединения образуются в аморфном состоянии. Аморфные слои тройных соединений составов $\text{CuGa}_5(\text{In}_5)\text{Se}_8$ и твердые и растворы образующиеся на их основе стабильны при комнатной температуре и кристаллизуются в интервале температур 383 – 393 К. CuIn_5Se_8 при температуре 423 К претерпевает полиморфное превращение.

Измерительные приборы и система сбора данных время пролетных измерений нейтронного комплекса ИЯИ РАН

*В. Н. Марин¹, Р. А. Садыков^{1, 2}, Д. Н. Трунов^{1, 3},
В. С. Литвин^{1, 4, 5}, С. Н. Аксенов^{1, 3}*

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

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

В качестве детекторов тепловых нейтронов используется **новый** тип линейных сцинтилляционных детекторов на основе ZnS(Ag)/LiF и кремниевых фотоумножителей, разработанных в ИЯИ РАН. Эти детекторы имеют собственную эффективность 60%, обладает чувствительностью к гамма квантам на уровне 10⁻⁶, отсутствуют высоковольтные источники питания, отсутствие собственных шумов до + 30°С, загрузочная способность не менее 300 кГц. Основной размер счетчика 15 x100мм. Для более эффективного сбора рассеянных нейтронов, в т.ч. увеличения телесного угла, в лаборатории нейтронных исследований ИЯИ РАН разработан кольцевой детектор тепловых нейтронов на основе твердотельных счетчиков нового типа. Данная геометрия обеспечивает высокую эффективность, т.к. захватывает кольцо Шеррера полностью, что особенно важно при исследованиях образцов малых размеров, также данная схема позволяет исследовать текстуру поликристаллических образцов. Применение данных счетчиков в кольцевых детекторах по сравнению с гелиевыми счетчиками позволило резко сократить размер «мертвых зон» детектора. **Получен патент РФ на полезную модель №177857.** Система сбора данных включает в себя детекторы, усилители формирователи, блока синхронизации, измерительные время – цифровые преобразователи с накоплением гистограмм, КАМАК крейт контроллера, компьютера управления и сбора информации и главного компьютера удаленного доступа.

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. Кузьмин Е.С., Дроздов В.А., Жук В.В. и др. // ПТЭ. 2008. № 5. С. 5–15.

2. Губер Ф.Ф., Ивашкин А.П., Марин В.Н., Садыков Р.А. // Сцинтилляционный ZnS(Ag)/LiF детектор тепловых нейтронов со съемом сигнала лавинными фотодиодами. Препринт ИЯИ РАН № 1361/2013. М., 2013. 12 с.

3. <http://ketek.net/products/sipm/>

4. <http://sensl.com/products/silicon-photomultipliers/>

5. Рябов Ю.В., Грачев М.И., Каманин Д.В., Кузнецова Е.А., Кузнецов В.Л., Коптелов Э.А., Либанова О.Н., Литвин В.С., Матушко В.Н., Разин В.И., Садыков Р.А., Соболевский Н.М., Федченко В.А. // ФТТ. 2010. Т. 52. В. 5. С. 957–961.

Исследование структуры мицеллярных и везикулярных систем методом малоуглового рассеяния

*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*

Целью данной работы являлось получение структурной информации о мицеллярных и везикулярных системах методом малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. В качестве мицеллярной системы была рассмотрена соль желчной кислоты (холат натрия), а фосфолипидная транспортная наносистема (ФТНС) является везикулярной системой.

Холат натрия ранее рассматривался либо в смешанных системах, либо при более высоких концентрациях. Основным интерес к ФТНС был вызван тем, что никто до этого не мог «рассмотреть» структуру этой системы.

Исследования проводились 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. Стрекалова О. С. Фосфолипидные наночастицы: получение, характеристика, использование для транспорта лекарств в организме // Москва. – 2010. – С. 72-74;
3. Zemlyanaya E. V. et al. The Small-Angle Neutron Scattering Data Analysis of the Phospholipid Transport Nanosystem Structure // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – Т. 1023. – №. 1. – С. 012017;
4. Маслова В.А., Киселев М.А. Структура мицелл холата натрия. Кристаллография, том 63 (2018) с.446-450.

**Нейтронные исследования
закрытых древнерусских крестов-энколпионов**

*М. М. Мурашев¹, В. П. Глазков¹,
Э. А. Грешиников¹, И. Е. Зайцева²*

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

² *Институт археологии Российской академии наук, Москва, Россия*

В рамках данной работы были проведены исследования 4-х археологических объектов, а именно крестов-энколпионов (XI–XVI вв.). Они отличаются от крестов-тельников тем, что состоят из двух створок между которыми располагается полость, так называемый реликварий. В реликварии могут находиться различные вложения, от частиц ладана и воска, до различного рода христианских ценностей.

Метод нейтронной томографии использовался для визуализации внутреннего строения крестов-энколпионов. Так как вложения реликвария могут иметь органическую природу, их визуализацию возможно провести только, используя метод нейтронной томографии. По причине того, что полное сечение взаимодействия тепловых нейтронов не зависит от номера элемента, как например, у рентгеновского излучения, это позволяет обнаружить вещества, содержащие легкие элементы (например, органические вещества). Эксперименты по нейтронной томографии проводились на станции «Дракон», ИР-8, НИЦ КИ.

В рамках данного исследования особый интерес представляют результаты, полученные методом нейтронной томографии и дифракции креста-энколпиона XVI в. найденного на территории Новодевичьего монастыря. В ходе томографического исследования были обнаружены некоторые фрагменты неизвестного происхождения в реликварии креста. В горизонтальной части реликвария находится некоторое количество мелких частиц, в центральной и нижней частях обнаружены вложения, имеющие узкую продолговатую форму (0.75–1.5 мм толщиной) похожие на нить или фрагмент растительного происхождения. Также было обнаружено наличие верхнего и нижнего запорного штифта, из чего был сделан вывод, что крест не вскрывался. Были найдены надписи, располагающиеся под слоем окислов снаружи. По результатам нейтронной визуализации было принято решение о проведении дополнительного исследования методом нейтронной дифракции. Полученные результаты позволили сделать вывод, что все составные части креста-

СЕССИИ СТЕНДОВЫХ ДОКЛАДОВ

энколпиона были отлиты из одного и того же металла. Подтвердилось наличие вложений, нитевидные вложения имеют органическую природу. Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на станции «Диск», ИР-8, НИЦ КИ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ ОФИ-м № 17-29-04129.

Современная установка для нейтронной радиографии и томографии для прикладных исследований на базе реактора ВВР-К

*Б. Мухаметулы^{1, 2, 3}, С. Е. Кичанов³, Е. В. Лукин³, А. А. Шаймерденов²,
К. Назаров³, И. А. Чупраков^{1, 2, 3}*

¹ *Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

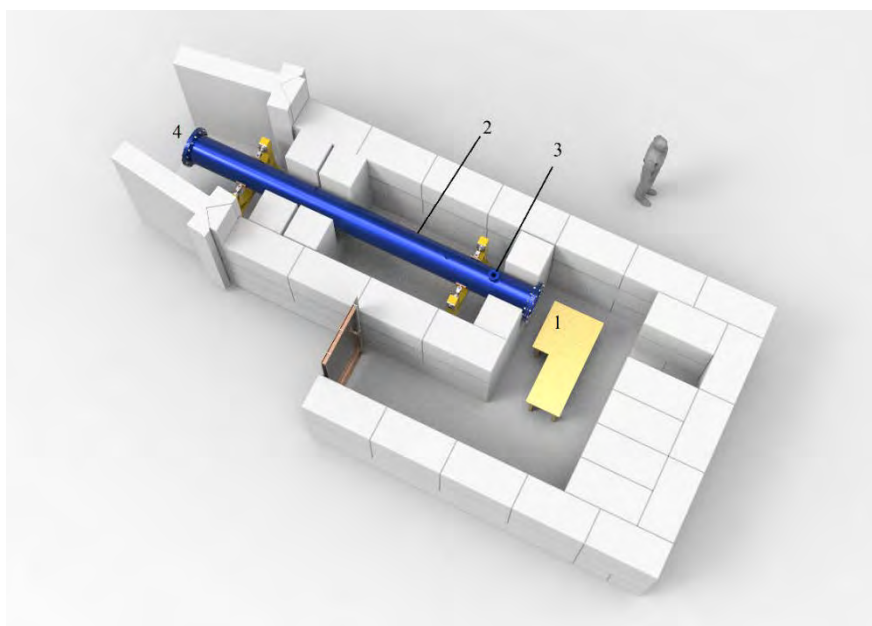
² *Институт ядерной физики МЭРК, Алматы, Казахстан*

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

На реакторе бассейнового типа на тепловых нейтронах ВВР-К создается экспериментальная станция для проведения исследований с помощью метода нейтронной радиографии и томографии. Нейтронный пучок сечением 20x20 см формируется системой коллиматоров, для которой значение характеристического параметра L/D может варьироваться от 350 до 2000.

В представленной работе подробно описывается конструкция и основные параметры новой экспериментальной установки для исследований с помощью нейтронной радиографии и томографии, созданной на 1-ом канале реактора ВВР-К.

Основные параметры экспериментальной установки для исследований с помощью нейтронной радиографии и томографии (рис.).



Обозначены: 1 – детекторная система и система поворотных и наклонных гониометров для позиционирования исследуемого образца в нейтронном пучке; 2 – вакуумированный кожух системы коллиматоров, формирующих нейтронный пучок; 3 – вакуумный пост для откачки воздуха из кожуха системы коллиматоров; 4 – место расположения монокристаллического висмутового фильтра для нейтронного пучка и коллиматор

Использование опорного слоя гадолиния в нейтронной рефлектометрии магнитных металлических наногетероструктур

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

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

Нейтронная рефлектометрия поляризованных нейтронов является мощным методом изучения плоских гетероструктур и их интерфейсов, а также может предоставить информацию о магнитной структуре многослойных металлических тонких пленках со сложным химическим составом.

Разработанный ранее [1] модельно-независимый метод, основанный на резонансном взаимодействии ядер изотопов гадолиния с нейтронами, позволяет определить коэффициент отражения и потенциал рассеяния, используя экспериментальные данные рефлектометрии поляризованных нейтронов.

Было установлено, что фазовая проблема для определённого класса структур может быть решена с помощью нанесения на исследуемую пленку опорного слоя гадолиния и проведения трех рефлектометрических измерений при различных углах падения первичного пучка. Различие в этих экспериментальных данных, позволяющее математически восстановить коэффициент отражения для исследуемой части образца, обусловлено резонансным взаимодействием ядер двух изотопов Gd^{155} и Gd^{157} с тепловыми нейтронами [2].

Следует отметить, что параметры рассеяния опорного слоя гадолиния должны быть хорошо известны для каждого исследуемого образца [3].

Первые экспериментальные апробации данного метода проводились на установке REFLEX-P импульсного реактора ИБР-2 (г. Дубна) для простых систем: однослойная пленка $Si/Ti(500\text{Å})/Gd(50\text{Å})/V(50\text{Å})$ и трехслойная пленка $Si/Cr(300\text{Å})/Fe(300\text{Å})/Cr(200\text{Å})/Gd(50\text{Å})/V(50\text{Å})$. Были получены зависимости интенсивности отражения нейтронов для трех различных углов. По этим данным были рассчитаны модуль и фаза коэффициента отражения.

В данной работе также представлены результаты эксперимента на сверхрешетке $Si/Cr(100\text{Å})/[Fe(80\text{Å})/Cr(10.5\text{Å})]_8/Cr(20\text{Å})/Gd(100\text{Å})/V(50\text{Å})$. Целью данного эксперимента является опять же апробация нашего метода, но именно в определении магнитной структуры. На данном образце были проведены измерения коэффициента отражения при трех различных углах в модах «++» и «--».

Эта работа проводилась в рамках государственного задания «Спин» АААА-А18-118020290104-2, при частичной поддержке УрО РАН (проект 18-10-2-37), РФФИ (проект 18-32-00197) и Министерства образования и науки РФ (договор 14. Z50.31.0025).

1 E.S. Nikova, Yu.A. Salamatov, E.A. Kravtsov, V.V. Ustinov, Determination of neutron scattering potential of the thin multilayered film with gadolinium reference layer. Superlattices and Microstructures, Vol. 109, 2017, pp. 201—208.

2. J.E. Lynn, P.A. Seeger. Resonance effects in neutron scattering lengths of rare-earth nuclides. Atomic Data and Nuclear Data Tables 44, p. 191 (1990).

3 Yu.A. Salamatov, E.S. Nikova, E.A. Kravtsov and V.V. Ustinov, Neutron scattering characteristics of gadolinium thin film: experimental determination. International Conference «Condensed Matter Research at the IBR-2». Тезисы докладов, 2017.

**Исследование пленок Ru/Co/W/Ru с взаимодействием
Дзялошинского-Мория методом XMCD**

*А. В. Огнев¹, А. С. Самардак¹, А. Г. Колесников¹, М. С. Платунов^{2, 3},
А. Рогалев²*

¹ *Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

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

Усиление спин-орбитальных эффектов, возникающих в системах ферромагнетик (ФМ)/тяжелый металл (ТМ), возможно вследствие нарушения симметрии в слоистых пленках на интерфейсах. Мы обнаружили, что введение тонкой прослойки W между Co и Ru в пленках Ru/Co/Ru позволяет сохранить перпендикулярную магнитную анизотропию (ПМА) и индуцировать сильное межфазное или интерфейсное взаимодействие Дзялошинского-Мория (iDMI). Установлено, что в пленках Ru/Co/W/Ru сохраняется ПМА при толщине W (t_w) меньше, чем 0,35 нм. С помощью метода бриллюэновской спектроскопии найдено резкое увеличение значения iDMI с ростом t_w . Максимальная величина iDMI равная $-3,1$ эрг/см² наблюдается при $t_w = 0,24$ нм, что в 10 раз больше, чем в симметричных пленках Ru/Co/Ru [1].

Поликристаллические пленки Ru/Co/W/Ru были получены магнетронным распылением на подложках SiO₂ при комнатной температуре. Измерения методом рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD) на K-крае поглощения (7709 эВ) Co, L₃ (10207 эВ) и L₂- (11544 эВ) краях поглощения W на образцах Ru(10нм)/Co(1 нм)/W(x)/Ru(2 нм) были выполнены на ускорителе ESRF ID12. Исследованы четыре образца с $x = 0, 0,21, 0,25$ и $0,29$ нм.

Сравнение нормализованных спектров XANES, зарегистрированных на K-крае поглощения Co с данными из [2, 3] показывает, что Co имеет ГПУ структуру и практически не изменяется после осаждение вольфрама.

Из проведенных оценок следует, что орбитальный магнитный момент примерно в 10 раз слабее спинового магнитного момента $m_L < \pm 0,002$ и $m_S \sim -0,023 \pm 0,004$ для исследованных образцов. Индуцируемый магнитный момент W антиферромагнитно связан с моментом Co. Наблюдается заметная разница в интенсивности поглощения, так называемых белых линий, на L_{3,2}-краях поглощения W, что вероятно обусловлено изменением 5d DOS выше уровня Ферми.

Работа выполнена при поддержке ESRF, РФФИ (гранты № 18-5253038 и №18-57-76001), Минобрнауки РФ (ГЗ 3.5178.2017/8.9 и 3.4956.2017).

Образцы получены на оборудование ключевой лаборатории «Материалы» в ДВФУ.

1. A. Samardak et al., APL, 112, 19, 192406 (2018).
2. Yu. A. Kozinkin et al., Phys. Solid State 53 (2011).
3. D. J. Sprouster et al., Appl. Sci. 2 396-442 (2012).

Опыт разработки установки импульсно-лазерного осаждения для *in situ* роста и исследования тонких пленок в условиях сильных магнитных полей и низких температур

П. Прокопович, К. Максимова, А. Гойхман

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, НОЦ «Функциональные наноматериалы», Калининград, Россия

Изучение свойств тонких пленок и гетероструктур различными методами в условиях низких температур (<15 К) и сильных магнитных полей (>1 Т) играет ключевую роль для исследования широкого диапазона магнитных систем. *In situ* характеристика микроструктуры, электронных, магнитных, оптических свойств тонкопленочных материалов и гетероструктур позволяет исследовать их непосредственно в процессе роста. Осуществление подобных исследований на мегасайнс установках открывает возможность для перспективных исследований таких систем *in situ*. Например, метод спин-чувствительной нейтронной поляризационной рефлектометрии (NPR) чрезвычайно чувствителен к структурным и магнитным свойствам материалов. Существуют и другие дифракционные и спектроскопические методы, реализованные на синхротронных и нейтронных источниках, которые могут найти применения в условиях низких температур и сильных магнитных полей (например, XRD, XRR, NR, EXAFS, XANES и т. Д.). Особый интерес представляют такие методики для исследования начальных этапов процессов роста. Метод импульсного лазерного осаждения (PLD) имеет значительное преимущество перед другими техниками, благодаря широкому спектру синтезируемых материалов, и выдающейся гибкости метода. Несмотря на привлекательность осуществления роста и исследования материалов *in-situ*, представленная PLD-установка является первой интегрированной в низкотемпературные и мощные магнитные поля на синхротронном или нейтронном источнике.

Основными особенностями системы являются: возможность перемещения образца из положения напыления в аналитическое положение, лазерный ИК-нагрев образца, температура образца на холодном пальце составляет 10К, температура образца в положении напыления составляет около 600К, уровень вакуума 10^{-8} Па, ультракомпактный дизайн установки.

Выводы. Продемонстрирована возможность создания установки PLD в условиях чрезвычайно ограниченного пространства - в зазоре между полюсами электромагнита, равном 100 мм. Продемонстрирована возможность *in situ* роста и исследования тонкопленочного образца в условиях низких температур и мощных магнитных полей и способ переноса образца из зоны роста на холодный палец криостата в условия высокого вакуума.

1. Kreuzpaintner W. et al. In situ Polarized Neutron Reflectometry: Epitaxial Thin-Film Growth of Fe on Cu (001) by dc Magnetron Sputtering //Physical Review Applied. – 2017. – Т. 7. – №. 5. – С. 054004.

Исследование методом нейтронографии структурного состояния ферритно-мартенситных сталей ЭК-181, ЧС-139 после термической обработки и облучения в ядерном реакторе

*В. И. Воронин¹, Б. Н. Гоцицкий¹, Н. В. Проскурнина¹, В. М. Чернов²,
Н. М. Митрофанова²*

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

² *АО «Высокотехнологичный научно-исследовательский институт неорганических материалов», Москва, Россия*

В работе представлено исследование методом нейтронной дифракции высокого разрешения влияния облучения быстрыми нейтронами ($E_n \geq 0,1$ МэВ, флюенсы 10^{18} , 10^{19} и 5×10^{19} см², температура облучения $T_{\text{обл}} \leq 340$ К) на микроструктуру и фазовый состав ферритно-мартенситных сталей типа ЭК-181 и ЧС-139, исходно подвергнутых различным термообработкам. Дифракционные нейтронографические исследования проводили на дифрактометре Д7А, который установлен на горизонтальном канале реактора ИВВ-2М. Длина волны монохроматических нейтронов $\lambda = 1.5302$ Å, угловое разрешение дифрактометра составляло $\Delta d/d = 0.002$. Время измерения одного дифракционного спектра – около 80 часов. Данные были получены в угловом интервале от 25^0 до 120^0 по 2θ с шагом 0.1^0 .

Установлено, что все исследованные после термообработки образцы ЭК-181 и ЧС-139 являются однофазными твердыми растворами с ОЦК структурой. Термообработка приводит к уширению рефлексов основной фазы, связанному с возникновением микронапряжений в объеме образцов. Максимальные величины микронапряжений наблюдаются в обоих типах образцов сталей ЭК-181 и ЧС-139 после нагрева до 1100^0 С, выдержки 40 минут, охлаждения на воздухе до 720^0 С, выдержки 3 часа, охлаждения на воздухе до комнатной температуры.

Показано, что при облучении быстрыми нейтронами проходят конкурирующие процессы - возникают новые радиационные дефекты и, в тоже время, проходят радиационно-стимулированные процессы отжига существующих дефектов. Реализуемое структурное состояние в сталях ЭК-181 и ЧС-139 зависит как от флюенса облучения, так и от исходного состояния образцов. Различия в радиационных изменениях параметров решёток и микронапряжений в сталях ЭК-181 и ЧС-139, исходно подвергнутых различным термообработкам связаны с различным химическим составом этих сталей.

Работа выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Поток» № АААА-А18-118020190112-8.) при частичной поддержке гранта РФФИ № 18-02-00270.

Изучение фрактальных объектов методом численного Фурье-анализа в пространстве двух измерений

П. М. Пустовойт, Е. Г. Яшина, Э. О. Быков, К. А. Пшеничный, С. В. Григорьев

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

Изучая фрактальные структуры, необходимо определить размерность Хаусдорфа. Для объектов субмикронных размеров разработана методика определения фрактальной размерности с помощью малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения. В основу метода положен закон зависимости интенсивности рассеянного излучения от переданного импульса $I(Q) = A Q^{-D}$, где показатель степени D характеризует фрактальную размерность.

Для изучения фрактальных структур с размерами от микрона и более необходимо использовать длинноволновое, оптическое излучение. Однако, из-за поглощения света веществом эксперименты по малоугловому рассеянию зачастую следует рассматривать как прохождение через маску, границы которой определены формой поглощающей частицы или объекта. Такой эксперимент по малоугловому рассеянию света можно смоделировать, численно определив двумерную карту интенсивности рассеяния как квадрат модуля Фурье-образа от двумерной проекции объекта.

В работе численно моделировали рассеяние на фрактальных и нефрактальных двумерных объектах. Интенсивность двумерной картины рассеяния радиально усредняли, получая кривую рассеяния $I(Q)$. Модельная кривая рассеяния для круга (как и для других объектов с резкой границей) спадает по закону Q^{-3} . Значение фрактальной размерности совпадает с теоретически предсказанными величинами для двумерных регулярных фракталов: ковра Серпинского ($D = 1.87 \pm 0.23$), треугольника Серпинского ($D = 1.62 \pm 0.03$), снежинки Коха ($D = 1.31 \pm 0.03$) и снежинки Вишека ($D = 1.58 \pm 0.07$). Все полученные фрактальные размерности лежат в интервале от 1 до 2. По аналогии с поверхностным фракталом в трехмерном пространстве можно определить «приграничный» фрактал в двумерном пространстве, когда с одной стороны фрактальной границы пустота, а с другой однородная среда, т.е. объект закрашен. Для такого «приграничного» фрактала фрактальная размерность будет равна $2d - \Delta$, где $d = 2$ – размерность пространства Δ – наклон прямой, аппроксимирующей данные, лежащий в интервале от 2 до 3.

Измерение остаточных напряжений в международном стандартном образце VAMAS на дифрактометре СТРЕСС реактора ИР-8*И. В. Карпов¹, С. А. Рылов¹, В. Т. Эм¹, В. В. Сумин²*¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

В настоящее время существует лишь два неразрушающих метода определения остаточных деформаций, имеющих международные стандарты: нейтронной и рентгеновской дифракции. При этом метод рентгеновской дифракции позволяет определять только двухосные напряжения на плоской поверхности исследуемого образца. Большая проникающая способность нейтронов в большинстве материалов позволила методу нейтронной дифракции стать единственным на данный момент методом, способным измерить тензор деформаций внутри массивного изделия толщиной в несколько десятков миллиметров. Поэтому во всех ведущих нейтронных центрах были созданы специализированные стресс-дифрактометры. На реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» в 2016 году был запущен нейтронный дифрактометр СТРЕСС для исследования внутренних деформаций.

Для сравнения различных нейтронных стресс-дифрактометров и оценки потенциальных возможностей нейтронного метода для измерения остаточных напряжений, в рамках международной программы VAMAS (Versailles Project on Advanced Material and Standards), был создан стандартный образец из алюминиевого сплава A17050. Остаточные деформации и соответствующие напряжения в образце создаются за счет тугой посадки поршня в цилиндр. Поршень, охлажденный до температуры жидкого азота, быстро вынимался из жидкого азота и вставлялся без приложения силы в цилиндр, выдержанный при температуре 50^oC. Образец был измерен в 11-ти крупнейших нейтронных центрах Европы и США.

Международный образец, созданный и протестированный по программе VAMAS TWA 20, был измерен на нейтронном стресс-дифрактометре СТРЕСС. В падающем и дифрагированных пучках нейтронов использовались кадмиевые щели шириной 2мм, установленные, соответственно, на расстоянии 40мм и 50мм от центра дифрактометра. Высота пучка составляла 10мм ($GV = 2 \times 2 \times 10 \text{мм}^3$) при измерении радиальной и тангенциальной компоненты и 3мм ($GV = 2 \times 2 \times 3 \text{мм}^3$) при измерении аксиальной компоненты. Данные условия обеспечили хорошее пространственное разрешение. Результаты измерений в пределах ошибок эксперимента согласуются с данными, полученными по программе VAMAS TWA 20, и хорошо описываются аналитической моделью для тугой посадки типа цилиндр – поршень.

Магнитное упорядочение сверхрешеток Fe/X/Gd (X=Cr, Pd)

*М. В. Рябухина¹, Н. О. Антропов¹, Е. А. Кравцов¹, В. В. Пролядо¹,
Ю. Н. Хайдуков², В. В. Устинов¹*

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

² *Институт физики твердого тела общества Макса Планка, Штутгарт, Германия*

Многослойные наноструктуры, образованные чередующимися слоями магнитных и немагнитных металлов – новый класс искусственных материалов, проявляющих уникальные магнитные и магнитотранспортные свойства. Для понимания механизмов эффектов, наблюдаемых в магнитных наноструктурах, необходимо определение на атомном уровне профилей намагниченности внутри отдельных слоев. Известно, что при взаимодействии магнитных слоев Fe и Gd их магнитные моменты выстраиваются антипараллельно. При создании искусственной магнитной системы, состоящей из чередующихся наноразмерных слоев Fe и Gd с прослойкой Cr [1] или Pd, становится возможным управлять взаимной ориентацией магнитных моментов слоев Fe и Gd, получать сложные магнитные структуры. Наличие парамагнитного слоя Pd, влечет к изменению характера обменного взаимодействия между соседними ферромагнитными слоями, а также возникает индуцируемый магнитный момент на атомах Pd вблизи интерфейсов [2, 3]. Сложное магнитное состояние в пленках Fe/X/Gd определяется несколькими конкурирующими механизмами: увеличением магнитного момента Gd и его независимостью от температуры в интерфейсной области вблизи Fe, сильным антиферромагнитным взаимодействием Fe - Gd в области границ раздела, и зеемановским взаимодействием намагниченности с магнитным полем.

В настоящей работе обсуждаются структурные и магнитные исследования систем Fe/X/Gd (X=Cr, Pd) с разными толщинами прослоек Pd и Cr. Серия сверхрешеток $[\text{Fe}(35 \text{ \AA})/\text{X}(t)/\text{Gd}(50 \text{ \AA})]_{12}$ (X=Cr, Pd), $t = 0 - 14 \text{ \AA}$, была выращена методом магнетронного распыления. Структурные исследования были проведены с помощью рентгеновской рефлектометрии, дифракции в геометрии скользящего падения и сняты карты диффузного рассеяния. Сверхрешетки Fe/Cr/Gd имеют поликристаллическую структуру, Fe/Pd/Gd – аморфную. Обнаружили, что введение тонкой прослойки приводит к переключению из антиферромагнитного состояния Gd - Fe в неколлинеарное.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» АААА-А18-118020290104-2 и при поддержке РФФИ (грант 18-32-00197).

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

2. L. Cheng, Z. Altounian, D. H. Ryan, J. O. Strom-Olsen, M. Sutton// Physical review B 69, 144403 2004.

3. A.Hoffman, J.W. Seo., M.R. Fitzsimmons, H. Siegwart, J.Fompeyrine, J.P. Locquet, J.A. Dura, C.F. Majkrzak, Phys. Rev. B 66 (2002),220406.

Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру сложного оксида кобальта $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$

*Д. П. Козленко¹, Н. Т. Данг², Н. О. Голосова¹, С. Е. Кичанов¹, Е. В. Лукин¹,
Б. Н. Савенко¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Institute of Research and Development, Duy Tan University, Duy Tan, Vietnam*

Исследования сложного кобальтита $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ представляют большой интерес благодаря уникальным магнитным свойствам, обнаруженным в этом соединении. Так, например, температурное поведение намагниченности этого соединения при очень низких температурах указывает на наличие явления квантового туннелирования в этом магнитном соединении. В сложном оксиде кобальта $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ было обнаружено появление спонтанной электрической поляризации, и как следствие существование магнитоэлектрической связи. На основе данных исследований при высоких давлениях: зависимостей межатомных расстояний и валентных углов, и связанных с ними магнитных свойств этого сложного кобальтита, - может быть выявлена природа и структурные механизмы формирования магнитоэлектрической связи в этом мультиферроике. Такие структурные данные могут быть получены из нейтронных дифракционных экспериментов при высоких давлениях.

Соответствующие эксперименты по нейтронной дифракции по исследованию кристаллической и магнитной структуры $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ при высоком давлении были выполнены на нейтронном дифрактометре ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ОИЯИ, г. Дубна, Россия). Эксперименты были выполнены с помощью камер высокого давления с сапфировыми наковальнями при высоких давлениях до 6.8 ГПа и в температурном диапазоне 10 - 290 К. Дополнительно, вибрационные спектры $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ исследовались методом рамановской спектроскопии при высоких давлениях до 30 ГПа.

Нейтронные дифракционные данные при высоком давлении указывают на подавление исходного магнитного состояния с волной спиновой плотности ($T_N = 25$ К) и стабилизацию коллинеарной соразмерной антиферромагнитной фазы с $T_N = 26$ К при давлениях выше 2.1 ГПа. Были проанализированы барические зависимости конкурирующих магнитных взаимодействий, соответствующих внутри и между цепочечным обменным взаимодействиям в структуре кобальтита $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$. Обсуждается роль баланса этих магнитных взаимодействий в формировании магнитной фазовой диаграммы исследуемого соединения. Барический коэффициент для температуры Нееля соразмерной антиферромагнитной фазы составил $dT_N/dP = 0.65$ К/ГПа, что хорошо согласуется с теоретическими расчётами.

Работа поддержана грантом РФФИ №18-02-00359-а.

Образование волны зарядовой плотности в системе $R\text{Ge}_{2.85}$ ($R = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$)

*Д. А. Саламатин^{1, 2, 3}, В. А. Сидоров¹, Л. Н. Фомичева¹, А. В. Саламатин²,
А. И. Величков², А. В. Николаев^{3, 4}, М. Будзинский⁵, А. В. Цвященко^{1, 4}*

¹ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Московский физико-технический институт (ГУ), Долгопрудный, Россия*

⁴ *НИИЯФ им. Д. В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

⁵ *Institute of Physics, University Maria Curie-Skłodowska, Lublin, Poland*

Поликристаллические образцы $R\text{Ge}_{2.85}$ (где $R = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$), синтезированные при высоком давлении, обладает кубической структурой AuCu_3 с пространственной группой $Pm\bar{3}m$. В этих соединениях имеется небольшое число вакансий в узлах Ge [1].

Ранее было показано, что в соединениях с Tb и Dy образуются волны зарядовой плотности (ВЗП) при температурах 145 и 80 К, соответственно. Также при атмосферном давлении при $T < 18$ К в данных соединениях образуется несоизмеримая антиферромагнитная спираль с волновым вектором $\mathbf{q} = (1/2, 0, 1/6 + x)$ (г.л.у.), где x – небольшой параметр несоизмеримости [2]. Также было показано, что T_{CDW} в соединениях с Tb и Dy уменьшается с увеличением давления примерно с одинаковой скоростью $dT_{CDW}/dP = -65$ К/ГПа [3].

С помощью метода возмущенных угловых гамма-гамма корреляций на пробных ядрах ^{111}Cd было показано, что в соединениях с Tb и Dy ВЗП является несоизмеримой в парамагнитном состоянии и переходит в соизмеримое состояние при $T < T_N$ [2].

С помощью измерений электрического сопротивления было показано, что в соединении $\text{GdGe}_{2.85}$ также наблюдается образование ВЗП при температуре $T_{CDW1} = 260$ К при атмосферном давлении. При этом T_{CDW1} также уменьшается с увеличением давления со скоростью -50 К/ГПа. Также в $\text{GdGe}_{2.85}$ при $T_{CDW2} = 125$ К и $T_{CDW3} = 30$ К образуются еще две ВЗП. T_{CDW3} слабо зависит от давления в данном диапазоне.

Было обнаружено, что в соединениях $R\text{Ge}_{2.85}$ T_{CDW} практически линейно связано с фактором де Жена $dG = (g-1)^2 J(J+1)$. Также подобная связь найдена и для некоторых других редкоземельных систем с ВЗП: $R\text{Te}_3$ и $R\text{NiC}_2$ ($R = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$).

Работа была поддержана грантом РФФИ № 17-02-00064.

1. A. V. Tsvyashchenko, A. I. Velichkov, et al., JALCOM, 552, 190 (2013).

2. A. V. Tsvyashchenko, D. A. Salamatin, et. al., Phys. Rev. B 92, 104426 (2015).

3. D. A. Salamatin, V. A. Sidorov, et. al., Phys. Rev. B 94, 214435 (2016).

Вращение спина нейтрона при дифракции по Лауэ в деформированном прозрачном кристалле без центра симметрии

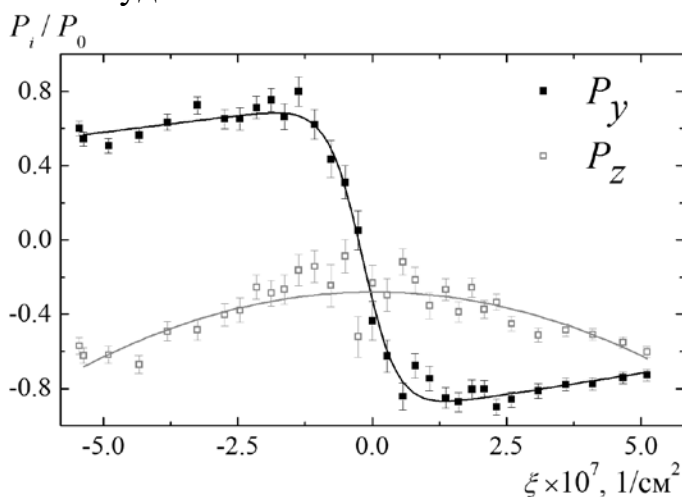
*С. Ю. Семенихин^{1, 2}, В. В. Федоров¹⁻³, В. В. Воронин¹⁻³,
Я. А. Бердников², И. А. Кузнецов¹*

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

² *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

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

Теоретически описан и экспериментально исследован эффект поворота спина нейтрона при дифракции по Лауэ в нецентросимметричном слабодеформированном и прозрачном для нейтронов кристалле [1]. Эффект возникает из-за искривления траектории нейтрона в кристалле при наличии деформации, что, при определенном виде деформации, приводит к уходу за пределы кристалла одной из двух нейтронных волн, возбуждаемых при дифракции по Лауэ, которые, в случае кристалла без центра симметрии, распространяются в электрических внутрикристаллических полях с противоположным знаком. В результате, спин оставшейся нейтронной волны, будет повернут на определенный угол по отношению к первоначальному направлению за счет взаимодействия магнитного момента движущегося нейтрона с внутрикристаллическим электрическим полем кристалла. В совершенном же недеформированном кристалле такой эффект отсутствует, имеет место только деполяризация пучка, поскольку обе волны, находящиеся в противоположных электрических полях, присутствуют с одинаковой амплитудой.



Поляризация продифрагировавшего пучка в зависимости от величины деформации кристалла

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (№ 3.3838.2017/4.6).

1. В.В. Воронин, В.В. Федоров, С.Ю. Семенихин, Я.А. Бердников. Письма в ЖЭТФ, 106(7) (2017) 463-466 / JETPL, 106(7) (2017) 481-484.

Магнитная структура Cu_2OSeO_3 в магнитном поле

Н. М. Чубова,¹ Д. О. Сканченко¹, А. Heinemann²,
В. А. Дядькин³, С. В. Григорьев^{1, 4}

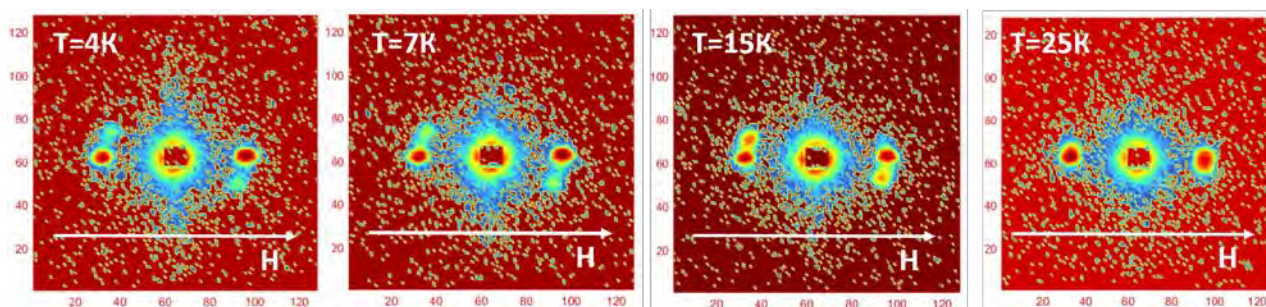
¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

³ Swiss-Norwegian beamlines at the European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

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

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучена магнитная структура соединения Cu_2OSeO_3 в диапазоне температур $T=[3\div 65]$ К в магнитном поле $H=[0\div 0,120]$ Т. Cu_2OSeO_3 является первым примером диэлектрика, являющегося нецентросимметричным кубическим киральным гелимагнетиком с пространственной группой $R2_13$ (тип кристаллической структуры B20). Элементарная ячейка содержит 16 атомов Cu [1,2], причем основным магнитным состоянием является ферримагнетизм, в то время как это ферромагнетизм для других соединений со структурой типа B20. Стоит отметить, что ферримагнитная структура Cu_2OSeO_3 закручивается в спираль с периодом $d = 646 \text{ \AA}$ ниже $T_C = 58 \text{ К}$. С приложением магнитного поля T_C наблюдаются скачкообразный переход системы из состояния: (i) спиновой спирали, с доменами, волновой вектор которых ориентирован вдоль осей типа $\langle 100 \rangle$ (ii) в коническую спираль с $k_C \parallel H$. В области температур близких к критическим в магнитных полях $H = [0,18\div 0,50]$ мТ наблюдается образование скирмионной гексагональной решетки с $k \perp H$. В области магнитных полей близких к переходу в ферримагнитное состояние $H_{C2} \sim 0,90$ мТ начиная с $T=15\text{К}$ в плоть до низких температур наблюдается «раздвоение» брэгговского пика (рис.). Мы связываем сложное поведение магнитной структуры в магнитном поле с анизотропией исследуемого соединения.



Карты интенсивностей МУРН от образца соединения Cu_2OSeO_3 во внешнем магнитном поле $H = 0.066$ Тл при различных температурах ниже T_C .

1. G. Meunier and M. Bertaud, J. Appl. Crystallogr. 9, 364 (1976).

2. H. Effenberger and F. Pertlik, Monatsh. Chem. 117, 887 (1985).

**Исследование компактного нейтронного суперзеркального
трансмиссионного поляризатора на кремнии**

В. Г. Сыромятников^{1, 2}, А. Воробьев³

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 *Institut Laue Langevin, Grenoble, France*

В работе [1] предложен новый нейтронный компактный суперзеркальный трансмиссионный поляризатор. Этот поляризатор значительно более компактен чем широко известный трансмиссионный поляризатор V-cavity! Поляризатор содержит набор из прозрачных для нейтронов пластин, помещенный в зазор магнита. Между пластинами нет воздушных промежутков. Поляризующее суперзеркальное покрытие без поглощающего подслоя напылено на полированные поверхности пластин. Магнитные и немагнитные слои суперзеркала также, как и материал пластин имеют очень близкие потенциалы для нейтронов (-) спиновой компоненты. В то же время, для нейтронов (+) спиновой компоненты потенциалы соседних слоев суперзеркала имеют значительную разность. В результате нейтроны (+) спиновой компоненты отражаются от суперзеркального покрытия, в то время как нейтроны (-) спиновой компоненты не отклоняются от своих первоначальных траекторий. Таким образом, нейтроны (-) спиновой компоненты доминируют вблизи оси распределения интенсивности от угла в прошедшем через поляризатор пучке, т.е. пучок будет иметь высокую отрицательную поляризацию. Недавно в ПИЯФ был создан такой компактный поляризатор на кремниевых пластинах с суперзеркальным CoFe/TiZr ($m = 2$) покрытием. Его размеры малы и равны 45x55x75 мм, но сечение поляризуемого им пучка вполне достаточно 30x30 мм. Как следует из расчетов, представленных в [1] для спектрального диапазона $\lambda = 4.5 \div 10 \text{ \AA}$ при расходимости пучка 8 мрад поляризация прошедшего через поляризатор пучка не хуже, чем -0.99, средний коэффициент пропускания (-) спиновой компоненты при этом тоже высок и равен 0.85.

В докладе будут представлены результаты измерений этого поляризатора на нейтронном рефлектометре СуперАДАМ (ИЛЛ, Гренобль, Франция).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, Соглашение №14.607.21.0194 от 26 сентября 2017 г., RFMEFI60717X0194.

1. V.G. Syromyatnikov, V.M. Pusenkov. New compact neutron supermirror transmission polarizer. - J. Phys.: Conf. Ser. 862 (2017) 012028 (13 pages).

Использование прерывателя нейтронного пучка, формирующего спектр в поляризационном нейтронном эксперименте

В. Г. Сыромятников

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

В работах [1, 2] предложен прерыватель нейтронного пучка нового типа для измерений по время-пролетной методике (TOF). С помощью этого прерывателя можно формировать спектр нейтронов требуемой ширины и в заданном диапазоне длин волн, сократить время TOF измерений, полностью устранить нежелательный вклад длинноволновых нейтронов. Использование предлагаемого прерывателя в трехдисковой версии позволит добавить к вышеупомянутым преимуществам возможность проводить TOF измерения с постоянным относительным разрешением по длине волны в широком диапазоне длин волн. Показано, что с помощью этого прерывателя можно значительно улучшить разрешение по длине волны для нейтронных установок на монохроматических пучках (например, для нейтронного рефлектометра SuperAdam (ILL, Grenoble, France)), выполнив TOF измерения на этих пучках. Это не может быть достигнуто при использовании стандартного однодискового прерывателя без значительных потерь интенсивности.

В докладе показаны преимущества использования предлагаемого прерывателя в поляризационном нейтронном TOF рефлектометре «ЛИРА» (реактор ПИК, ПИЯФ) с вертикальной плоскостью рассеяния по сравнению с известными прерывателями нейтронного пучка.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, Соглашение №14.607.21.0194 от 26 Сентября 2017г., RFMEFI60717X0194.

1. V.G. Syromyatnikov. The chopper of a new type and its use in a neutron experiment. – The Proceedings of International Conference on Neutron Optics (NOP 2017) (5-9 July, 2017, Japan). To be published in Journal of Physical Society of Japan: Conference Series in July-August 2018.
2. В.Г. Сыромятников. Заявка № 2018111567 на патент РФ на изобретение «Прерыватель нейтронного пучка». Приоритет от 30.03.2018.

Изотермическая сжимаемость $TiGdX_2$ (X-S, Se, Te)

Д. Д. Байрамов, Т. Г. Джафаров, Х. В. Алигулиева, А. Ф. Талыфлы

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

По экспериментальным данным о коэффициента изотермической сжимаемости вычислены некоторые упругие параметры: модуль Юнга (E), коэффициент Пуассона (σ) и модуль сдвига (μ) в кристаллической решетке $TiGdS_2$, $TiGdSe_2$ и $TiGdTe_2$. Выявлено, что при переходе от сульфида к селениду и теллуриду упругие параметры E и σ увеличиваются, а μ уменьшается, что объясняется увеличением степени ионности химической связи в данном ряду.

1. Д. Д. Байрамов. Электрофизические и упругие свойства твердых растворов $TiIn_{1-x}Gd_xS_2$, Дис. на соис. ус.ст.к.ф-м.наук, Баку,1991, с.50-59.
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц Теория упругости. М: Наука 1965
3. М. М. Курбанов, Д. Д. Байрамов, Н. С. Сардарова Тепловое расширение $TiInX_2$ (X-S, Se, Te), Неорг. матер. 2002. т.36.№2.с.183-184.

Методы молекулярного моделирования: фитирование структур, поиск жёстких структурных доменов

А. И. Тутов, А. В. Швецов

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

На сегодняшний день развитие методов молекулярно-динамического моделирования (МД) позволяет создать реалистичные модели для всевозможных соединений и биомакромолекул, а также получить их траектории движения на временных отрезках до десятых долей микросекунды. Данные модели и траектории не только содержат предполагаемую полноатомную структуру изучаемого объекта, но и потенциальную информацию о физической взаимосвязанности отдельных частей структуры.

В отличие от методов МД, методы по изучению полученных траекторий не успели получить широкого развития, в частности до сих пор используются алгоритмы, разработанные более 15-20 лет назад, когда размер изучаемых структур и рассматриваемые времена были на порядки меньше, чем в наше время. В результате чего, при работе с большими структурами или на временах, больших чем десятков наносекунд, имеющиеся алгоритмы начинают работать неточно или в целом ошибочно. Между тем, именно крупномасштабная конформационная подвижность с характерными временами в десятки и сотни наносекунд может регистрироваться методами малоуглового нейтронного рассеяния и нейтронного спин-эхо.

Для решения этих задач представлены две новые разработки алгоритмов анализа траекторий МД:

- алгоритма пространственного наложения (фитирования) – позволяет совмещать структуры, минимизируя общее расстояние между выбранными подмножествами атомов;
- алгоритма поиска жёстких структурных доменов – позволяет выделить в структуре подмножества атомов, которые своим движением во времени идентичны цельной жёсткой структуре с заданными параметрами жёсткости.

Автоматизированная многоосевая система позиционирования для проведения томографических и дифракционных экспериментов

*Д. Н. Трунов^{1, 2}, С. Н. Аксенов^{1, 2}, М. М. Мурашев²,
Р. А. Садыков¹, В. П. Глазков², В. Т. Эм²*

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Москва, Россия*

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

Разработана многоосевая система позиционирования образца и детектора для проведения томографических и дифракционных измерений для установки «ДРАКОН» реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский Институт». Система состоит из защитной заслонки, узла позиционирования образца, узла позиционирования детектора, блок управления шаговыми двигателями и программной библиотеки для автоматизации перемещения, написанной на NI LabView. Благодаря поддержке различных устройств перемещения и различных типов детекторов возможна быстрая настройка системы под требуемые типы экспериментов.

Разработаны библиотеки для работы с:

- системами перемещения Standa, Physical instrument;
- контроллерами шаговых двигателей Onitex, ООО «МП» Реабин;
- детекторами типа CCD Atik, ООО «ВИДЕОСКАН»;
- детектором типа Image Plate Mar345.

Исследования методом малоуглового рассеяния нейтронов нанопористого материала МСМ-41 в гидрофильном и гидрофобном состояниях

*А. А. Белогорлов¹, Г. П. Копица^{2, 3}, Д. В. Львов^{1, 4}, П. Г. Мингалев⁵,
А. Н. Тюлюсов^{1, 4}, L. Almásy^{6, 7}, A. Len⁷*

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 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. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия*

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

⁶ *State Key Laboratory Cultivation Base for Nonmetal Composites and Functional Materials, Southwest University of Science and Technology, Mianyang, China*

⁷ *Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary*

В последнее время большой интерес вызывают нанопористые материалы, в частности МСМ-41 [1]. Материал матрицы представляет собой кварц SiO₂, который является гидрофильным. Гидрофобизирование осуществляется при помощи покрытия поверхности пор алкилсиланом.

Измерения были проведены на установке малоуглового рассеяния нейтронов «Yellow submarine» (реактор BNC, Будапешт, Венгрия) на длине волны нейтронов $\lambda = 4.9 \text{ \AA}$, $\Delta\lambda/\lambda = 18\%$. Использование двух дистанций образец-детектор SD = 1.57 и 5.5 м позволяло измерять интенсивность рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $0.01 < q < 0.3 \text{ \AA}^{-1}$.

Образцы представляли собой порошок гранул размерами порядка десятков микрометров. Вариация нейтронно-оптического контраста обеспечивалась различными средами, куда помещался порошок. Для гидрофобного и гидрофильного порошка были произведены измерения при контрасте с воздухом. Гидрофильный вариант помещался в D₂O и смеси H₂O и D₂O различных концентраций, в том числе подобранной для достижения «нулевого» контраста, т.е. равенства средних амплитуд рассеяния матрицы материала и среды. Образцы приготавливались при нормальных условиях, а также экспонировались 1 минуту при давлении 10 атмосфер.

Были определены средние размеры пор, также наличие упорядоченности их расположения. Показано, что для гидрофильного состояния достигается полное заполнение пор жидкостью как при повышенном, так и при нормальном давлении.

1. Gao Y., Chen H., Tay-Agbozo S., Kispert L. D., Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 341, 1 (2017).

От анализа нейтронно-структурных данных и результатов квантово-механических расчетов к разработке статистической модели Sigma- фазы в конструкционных материалах для атомной энергетики*А. Л. Удовский**Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия*

Концентрационную область стабильности ОЦК фазы лимитирует наличие охрупчивающих, например, в системах Fe-(Cr, V, Mo, W) σ -фаз. Моделирование структурных и термодинамических свойств σ -фазы для бинарных систем с учетом ее области гомогенности для квантово-механических расчетов (КМР) представляет значительные сложности, что обусловлено, во-первых, наличием большого числа атомов в кристаллической ячейке (30 атомов в ее кристаллической структуре, содержащей 5 подрешеток), имеющих разное координационное окружение, и, во-вторых, возникающим большим числом энергетических параметров парных межатомных взаимодействий атомов компонентов, равным для бинарных систем $5^2 = 25$. В целях решения этой проблемы был проведен анализ экспериментальных данных по нейтронно-структурным исследованиям Sigma-фазы сплава системы Fe-Cr, полученных Yael (Pauling – file), который позволил ввести понятия координационных сфер со средним радиусом вокруг атомов, расположенных на всех пяти подрешетках кристаллической структуры этой фазы. С другой стороны был проведен анализ результатов КМР полной энергии связи, параметров решетки и распределения парциальных магнитных моментов атомов Fe, расположенных на всех пяти подрешетках метастабильной Sigma – фазы чистого Fe, в зависимости от межатомных расстояний, что позволило сгруппировать их в 3 группы с координационными числами 12, 14 и 15. Это позволило разработать упрощенную статистическую модель для Sigma-фазы сплавов, заменив реальные 5 подрешеток 3-мя модельными подрешетками. Был записан функционал свободной энергии, учитывающий парные межатомные энергии между атомами обоих компонентов, расположенных в 3-х модельных подрешетках. Получена система уравнений основного состояния путем минимизации функционала по независимым структурным степеням свободы. Решение этой системы производили при выполнении условий положительности матрицы Гесса. Энергетические параметры модели вычисляли путем “привязки” к результатам КМР для стехиометрических составов для сплавов со структурой Sigma – фазы. Такой гибридный подход (КМР и статистическая модель) позволил использовать результаты КМР не только для основного состояния, но распространить эти результаты как для описания области гомогенности Sigma – фазы, так и при повышенных температурах с учетом колебательной и магнитной составляющих свободной энергии в приближении Дебая и в рамках формализма Индена-Хиллберта-Джарла соответственно.

Исследования были поддержаны грантом ОХНМ Президиума РАН III.5.2. Работа выполнялась по государственному заданию №007-00129-18-00.

Рефлектометр поляризованных нейтронов на нейтронной системе реактора ИР-8

В. А. Ульянов, А. П. Булкин, В. Г. Сыромятников, Н. К. Плешанов, С. И. Калинин, В. А. Соловей, М. Р. Колхидашвили, Л. А. Аксельрод, В. А. Матвеев, А. Г. Гилев, М. В. Дьячков, А. А. Сумбатян, Т. И. Глушкова

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

Рефлектометр поляризованных нейтронов (РПН) на нейтронной системе источника холодных нейтронов реактора ИР-8 разработан и изготовлен в НИЦ КИ-ПИЯФ с использованием опыта работы на рефлектометре НИЦ КИ-ПИЯФ NR-4М [1]. РПН создавался как прибор со следующими возможностями:

1. Достижение высокой (до 99,0%) поляризации монохроматического нейтронного пучка.
2. Изучение различных физических свойств зеркальных однослойных и многослойных образцов.
3. Возможность съемки зеркального и незеркального рассеяния нейтронов.
4. Реализация схем трехмерного анализа поляризации отраженного пучка.

В докладе будет представлено описание основных узлов РПН: фокусирующего монохроматора на основе кристаллов РГ, формирователя поляризатора, оптического концентратора, узла образца с электромагнитом, вверного анализатора поляризации, детекторной системы, вакуумной системы, электро-механических юстировочных устройств.

Исследования на данном рефлектометре важны для решения задач, связанных с созданием нейтронно-оптической компонентной базы с улучшенными характеристиками, прежде всего для приборов на реакторах ПИК, ИР-8, ИБР-2 и импульсном источнике нейтронов ИН-06.

Для управления РПН разработана система автоматизации с пользовательским интерфейсом, основанная на модульном принципе построения.

Авторы благодарят Е. Н. Медведева, Г. Е. Шмелева, С. И. Хахалина за помощь при реализации данного проекта.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение №14.607.21.0194 от 26.09.2017г., RFMEFI60717X0194.

1. V. G. Syromyatnikov, N. K. Pleshanov, V. M. Pusenkov, A. F. Schebetov, V. A. Ulyanov, Ya. A. Kasman, S. I. Khakhalin, M. R. Kolkhidashvili, V. N. Slyusar, A. A. Sumbatyan. Four-modes neutron reflectometer NR-4M. Preprint PNPI 2619 (2005), 47 pages.

Влияние допирования Mn на магнитный фазовый переход в LiNiPO_4

*Н. В. Урсова¹, М. А. Сёмкин^{1, 2}, А. И. Бескровный³, Д. С. Неов³, Д. Г. Келлерман⁴,
А. Н. Пирогов^{1, 2}*

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

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

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *Институт химии твёрдого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В нашей работе исследуется влияние 10 % замещения ионов никеля марганцем на температуру перехода соизмеримая – несоизмеримая антиферромагнитные (АФ) фазы и температуру Нееля соединения LiNiPO_4 .

Полученные ранее, из магнитных измерений, критические температуры перехода из соизмеримой АФ фазы в несоизмеримую АФ структуру показывают, что допирование марганцем повышает температуру этого перехода с $T_{IC-C} = 20.7(2)$ К до $T_{IC-C} = 22.6(2)$ К и температуру Нееля с $T_N = 21.8(2)$ К до $T_N = 23.2(2)$ К [1].

С целью установить магнитную структуру соединения $\text{LiNi}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{PO}_4$ мы провели нейтронографические измерения в интервале температур (10–295) К.

Измерения выполнены на установке ДН-2, смонтированной на реакторе ИБР-2 (г. Дубна). Образец представлял собой монокристалл, размером $(1 \times 1 \times 1.5)$ мм³, выращенный флюсовым методом.

На рис. приведены экспериментальные нейтронограммы $\text{LiNi}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{PO}_4$, полученные при сканировании в направлении $(0k0)$ в интервале температур от 21.3 К до 24.6 К с шагом 0.3 К. При 23.7(3) К исчезают магнитные Брэгговские рефлексы $(0\ 1\ 0)$ и $(0\ 3\ 0)$, соответствующие соизмеримой магнитной структуре. Магнитных сателлитов $(0\ 1 \pm \tau\ 0)$ на нейтронограммах не обнаружено. Можно предположить, что 10 % замещение ионов Ni ионами Mn в LiNiPO_4 подавляет несоизмеримую фазу.

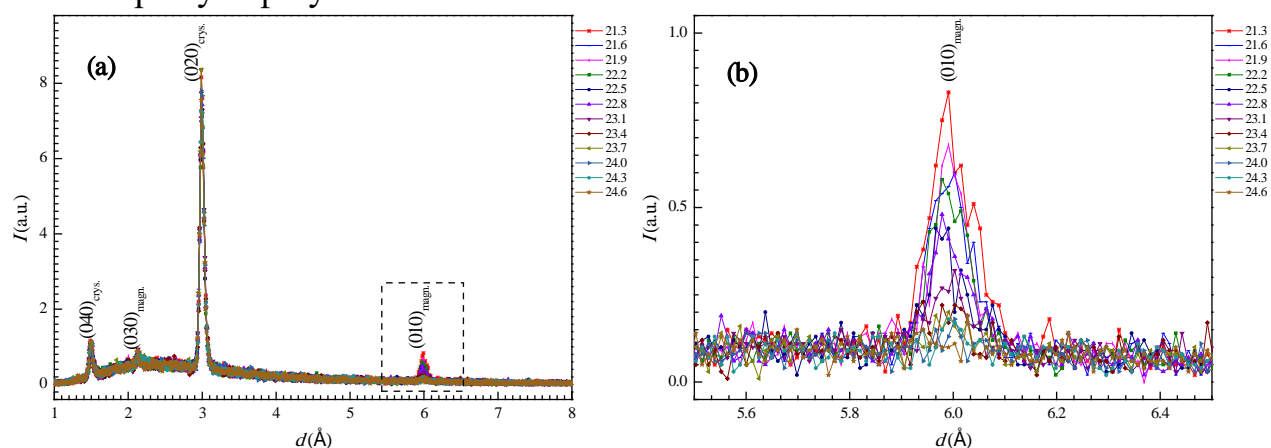


Рис. Экспериментальные нейтронограммы $\text{LiNi}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{PO}_4$, полученные при сканировании в направлении $(0\ k\ 0)$.

Работа частично поддержана программой «Поток» № АААА-А18-118020190112-8 и Государственным контрактом (№ 3.6121.2017/8.9) между УрФУ и Минобрнауки РФ.

1. M. A. Semkin, K.-Y. Choi, et al., AIP Conf. Proc. 1767, 020035 (2016).

Перенос радионуклидов в сильно неоднородных геологических средах

Т. В. Шаранова, Р. С. Макин

Дмитровградский инженерно-технологический институт – филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», Дмитровград, Россия

Одним из наиболее перспективных приложений «фрактального анализа» в настоящее время является почвенный мониторинг в рамках проведения эколого-аналитического мониторинга окружающей среды.

Исследования неклассических процессов переноса радионуклидов в сильно неоднородных геологических средах (почвах) отражают наиболее значимые особенности этих процессов. Например, определение показателя Хёрста, фрактальной размерности, значения корреляционной энтропии позволяют улучшить точность параметров и характеристик, описывающих миграционные процессы радионуклидов в почве, по сравнению с классическими законами.

При распространении радионуклидов в неоднородных геологических средах, убывание концентрации их примеси не соответствует классическим законам и происходит по степенному закону. Это убывание в супердиффузионном режиме происходит быстрее, а в субдиффузионном – медленнее, чем по классическому (гауссовому) закону.

Такой характер распространения радионуклидов в сильно неоднородных геологических средах (почвах) может представлять значительный риск в силу возможности их миграции на расстояния больше, чем считалось ранее.

Результаты исследования могут иметь не только теоретическое, но и прикладное значение и могут быть использованы при выработке методик обращения с ОЯТ и РАО, а также при обосновании безопасности объектов окончательной изоляции высоко-и среднеактивных отходов.

Выражаю благодарность своему научному руководителю Макину Руслану Сергеевичу за ценные советы при планировании исследования.

1. Б. Б. Мандельброт, Фрактальная геометрия природы, 856 (2002).
2. Б. М. Смирнов, Физика фрактальных кластеров, 134 (1991).
3. Н. А. Кудряшов, И. Е. Серебряков, Математическое моделирование миграции долгоживущих радионуклидов в почве в результате радиоактивных выпадений, 74, 3 (1993).

**Аналитическое выражение для описания осцилляций интенсивности
зеркального рефлекса от поверхности растущей
гетероэпитаксиальной пленки**

С. М. Шкорняков

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

В работе [1] теоретически был предсказан эффект размерного квантования коэффициента отражения электронов, падающих под малым углом скольжения на тонкую монокристаллическую гетероэпитаксиальную пленку. В работе [2] эта задача была решена с учетом среднего внутреннего потенциала кристаллической решетки пленки. В ней было получено выражение для коэффициента отражения $R(\alpha)$:

$$R = 1 - T = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda}{k} \operatorname{tg} \frac{kc}{2} \operatorname{ctg} \frac{\mu c}{2} - \frac{k}{\lambda} \operatorname{ctg} \frac{kc}{2} \operatorname{tg} \frac{\mu c}{2} \right)^2 \sin^2 \mu c N},$$

где T – коэффициент прохождения, $\lambda = \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E_1 + V_0)}{\hbar^2}}$, $E_1 = \left(\frac{\alpha\pi}{180}\right)^2 E$, E – энергия электронов, α – угол скольжения в градусах, V_0 – значение среднего внутреннего потенциала, c – период решетки, μ – блоховский волновой вектор электрона в кристалле.

В настоящем сообщении в качестве аргумента для R предлагается выбирать непрерывно (а не дискретно) изменяющееся число N , которое, таким образом, будет соответствовать средней толщине пленки. В результате расчетов по этим формулам получаются осцилляционные зависимости $R_\alpha(N)$ с периодом, определяемым значениями α . Новым является тот факт, что этот период может быть больше, чем $\Delta N = 1$. Этим полученные результаты отличаются от экспериментальных [3] и теоретических [4] ранее выполненных работ. По-видимому, все вышесказанное может быть применено и к рассеянию нейтронов.

1. Шкорняков С.М. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. (2013). №2. С. 99.
2. Шкорняков С.М. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. (2017). №6. С. 83.
3. Larsen P.K., Dobson P.J., Eds., RHEED and Reflection Electron Imaging of Surfaces (Plenum, New York, 1988)
4. Peng L.-M., Whelan M.J. // Surf. Sci. Lett. 238, (1990), L446-L452.

Структурные особенности гомогенных сложных церий-циркониевых оксидов по данным синхротронных и нейтронных экспериментов

А. Н. Шмаков^{1, 2}, Ю. Е. Фёдорова¹, С. В. Черепанова^{1, 2}, В. А. Садыков^{1, 2}

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

² Национальный исследовательский Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

С использованием набора комплементарных методов – дифракции нейтронов, рентгеновской синхротронной дифракции, полного рентгеновского рассеяния и рентгеновской спектроскопии поглощения – проведено исследование реальной кристаллической структуры однофазных гомогенных сложных оксидов $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_{2+\delta}$, приготовленных по модифицированному методу Пекини, и никелевых катализаторов углекислотной конверсии метана на их основе. Установлены изменения, происходящие в структуре в результате прокаливания образцов при температурах 600°C и 800°C и предварительной восстановительной обработки в потоке водорода при 600°C. Структура смешанных оксидов обладает тетрагональной симметрией, пр.гр. $P4_2/nmc:1$, что свидетельствует о гомогенном распределении катионов Ce и Zr в кристаллической решетке. Методом дифракции нейтронов показано существенное разупорядочение в анионной подрешетке. Предложена модель структуры, предполагающая внедрение молекул воды в анионные вакантные позиции, образующиеся при прокаливании или восстановительной обработке, в результате контакта с воздухом. Показано также, что разупорядочение в анионной подрешетке не сопровождается внедрением кислорода в межузельные позиции в объеме наночастиц.

Авторы выражают благодарность сотрудникам Лаборатории нейтронной физики им. Франка ОИЯИ и Курчатовского Комплекса Синхротронно-Нейтронных Исследований за помощь в проведении экспериментов. Работа выполнена в рамках государственного задания Института катализа им. Г. К. Борескова СО РАН (проекты АААА-А17-117041710078-1 и АААА-А17-117041110045-9).

1. Sadykov V.A., Simonov M.N., et al., Open Chemistry, 2016, <https://www.degruyter.com/view/j/chem.2016.14.issue-1/chem-2016-0039/chem-2016-0039.xml>
2. Sadykov V.A., Mezentseva N.V., et al., Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 2006, 988, QQ06-04.
3. Sadovskaya E.M., Ivanova Y.A., et al., The Journal of Physical Chemistry A, 2007, 111, 4498–4505.
4. Sadykov V.A., Mezentseva N.V., et al., Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 2007, 1023, JJ02-07.

Возможности канала 7Б реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» для использования в радиографии

М. Н. Шушунов, А. И. Гуреев, В. П. Глазков, Ю. Н. Панин, А. Н. Стрелетов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В последние годы в мире бурно развиваются методы неразрушающего контроля образцов, позволяющие определять внутреннее строение образцов и изделий. Радиография сегодня - один из самых важных, наиболее универсальный метод неразрушающего контроля. Используя высоко проникающие рентгеновские, нейтронные и гамма лучи, которые не повреждают образец, радиография обеспечивает регистрацию на пленке визуальной информации о внутреннем состоянии изделия.

С целью определения возможностей канала 7Б реактора ИР-8 Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт») для развития методов неразрушающего контроля, а также создания на пучке установки для радиографии были проведены исследования с помощью гамма, нейтронного и остаточного гамма излучения образцов. Рассматриваемые образцы представляют различные отрасли науки и техники (материаловедение, палеонтология, археология, аддитивные технологии и д. р.) с целью применения в дальнейшем установки и методики исследования в данных отраслях. В частности, показано распределение углерода по объему Fe-Ni-C образца, а также создан проект установки с пространственным разрешением порядка 50-100 мкм на данном канале.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00262 мол_а (радиография композитов Fe-Ni-C, обработка и обсуждение результатов).

Авторы благодарят РФФИ № 16-12-10065 за частичную поддержку настоящего исследования.

**Нейтронная диагностика материалов и изделий,
получаемых аддитивными технологиями,
на реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт»**

*В. П. Глазков¹, И. Д. Карпов¹, М. М. Мурашов¹, М. Н. Шушунов¹, В. Т. Эм¹,
Е. В. Яковенко¹, П. Б. Мазалов², С. В. Неруш², Е. А. Сульянова²*

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

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

Аддитивные технологии (АТ) являются сегодня очень перспективным направлением в современном машиностроении, поскольку кардинально снижают затраты на производство и делают возможным невозможное ранее изготовление деталей сложной формы и внутреннего строения. В качестве примера можно привести вертолётный двигатель, изготовленный в 2017 году компанией GE Aviation по АТ технологиям из 16 деталей вместо прежних 900.

Основной причиной, тормозящей широкое применение аддитивных технологий, является то, что АТ материалы создаются при больших градиентах температур и скоростях охлаждения, вследствие чего микроструктура этих материалов сильно отличается от микроструктуры традиционных материалов, целенаправленно сформированной для улучшения их свойств. Другим существенным отличием АТ материалов являются большие остаточные напряжения, которые даже в маленьких изделиях размером в несколько сантиметров могут достигать предела текучести. Остаточные напряжения могут исказить геометрическую форму и значительно ухудшить прочностные характеристики материала (коррозионную стойкость, усталостную прочность, устойчивость к образованию трещин), поэтому контроль остаточных напряжений абсолютно необходим для обеспечения надёжности и безопасности при эксплуатации изделий аддитивных производств.

Нейтронный комплекс на базе реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» имеет в своем составе три экспериментальные станции, которые могут быть особенно важны для неразрушающей диагностики АТ материалов и изделий. Дифрактометр для исследования остаточных напряжений СТРЕСС позволяет проводить прямые измерения микродеформаций и находить пространственное распределение (картирование) остаточных напряжений по объему. Станция нейтронной томографии ДРАКОН позволяет выявлять скрытые дефекты и визуализировать внутреннее строение сложных объектов, в том числе массивных. Двухкристальный дифрактометр ультра-малоуглового рассеяния нейтронов СТОИК позволяет исследовать микроструктуру материалов (поры и микротрещины), что актуально для термобарьерных керамических покрытий и пористых биомедицинских керамик.

В докладе представлены примеры исследования аддитивных изделий и материалов на реакторе ИР-8.



***The School «Neutron Scattering in
Condensed Matter Physics»***

SCIENCE

SCIENCE

Comparative microstructural analysis of several cement based matrices by means of SANS

*M. Balasoiu^{1, 2}, A.-C. Dragolici², L. Ionascu², M. Nicu², F. Dragolici²,
A. V. Rogachev^{1, 4}, N. T. Lizunov¹, O. L. Orelovich¹*

¹ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

² *“Horia Hulubei” National Institute of Physics and Engineering, Bucharest, Romania*

³ *Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia*

The incorporation of radioactive waste in the Portland cement matrix is the most widely used method for the waste management and disposal [1]. Cement matrix is the first and most important engineering barrier against the migration in the environment of the radionuclides from radioactive waste. To respect waste acceptance criteria (WAC) for disposal, the matrix must be stable in time from chemical, physical, mechanic and geometric point of view [2].

Not all the radioactive wastes are compatible with the Ordinary Portland Cement (OPC) matrix due to different chemical reactions that could be developed during the hydrolysis and curing steps of cement paste [3].

Neutron scattering techniques have been shown already to be useful for the determination of the spatial distributions of water-containing pores and the arrangement of pores and cracks inside the studied cement-based matrices [4], as well as for evaluating the long-time stability [5].

In the present research, a microstructural analysis of 4 hardened cement samples obtained from four special types of cements (MKP, CEM V, CEM III and WPC), accomplished at different length scales by means of small-angle neutron scattering and scanning electron microscopy, is reported.

SANS measurements were accomplished using the YuMO instrument in function at the pulsed reactor IBR-2 (FLNP-JINR Dubna).

RO-JINR Projects Nos. 323/21.05.2018 and 322/21.05.2018 item 120 and RO-JINR Grant No. 321 item 26 are acknowledged.

1. M. Nicu, L. Ionascu, C. Turcanu, et al., Rom. Journ. Phys. 53, 841 (2008).
2. L. Ionascu, M. Nicu, C. Turcanu, F. Dragolici, Gh. Rotarescu, Rom. Journ. Phys. 59(3–4), 360 (2014).
3. M. Nicu, L. Ionascu, C. Turcanu, F. Dragolici, Rom. Journ. Phys. 60(7–8), 1193 (2015).
4. S.E. Kichanov, K.M. Nazarov, D.P. Kozlenko et al., Rom. Journ. Phys. 63, (2018) (in press).
5. T.A. Lychagina, D.I. Nikolayev, M. Balasoiu et al., Rom. Journ. Phys., 2018 (accepted).

Extrusion bioprinting of model tissues that replicate the tumor microenvironment

M.-I. Bejenariu¹, F. Bojin^{2, 3}, A. Neagu^{2, 4}, A. Cean³, R. Popescu², M. Neagu², V. Păunescu^{2, 3}

¹ *Department of Physics, West University Timisoara, Romania*

² *Department of Functional Sciences, Victor Babes University of Medicine and Pharmacy, Timisoara, Romania*

³ *OncoGen Institute, Timisoara, Romania*

⁴ *Department of Physics & Astronomy, University of Missouri, Columbia, MO, U.S.A.*

Three-dimensional (3D) bioprinting has been employed to build increasingly complex models of the tumor microenvironment [1-7]. In this work, we aimed to develop 3D bioprinting methods for fabricating tumor models surrounded by extracellular matrix populated with peritumoral cells.

We built tumor models using the SK-BR-3 breast cancer cell line and the HT-29 colon adenocarcinoma cell line. We fabricated two sorts of tumor models (i) a ring model, with TAFs dispersed in hydrogel shaped as a peritumoral ring and tumor cells dispersed in hydrogel in the centre of the ring, and (ii) a triple layered construct made of three concentric rings below and one above the ring model, thereby completely surrounding the tumor cells with hydrogel loaded with peritumoral cells. We printed the proposed structures in a 24-well plate. The constructs were then crosslinked using CELLINK Crosslinking Agent and cured in UV radiation (365 nm wavelength).

We characterized the constructs via histology, and evaluated cell viability using the acid phosphatase assay. We also assessed characteristic cell markers by flow cytometry, immunohistochemistry, ELISA and qRT-PCR (CD29, CD90, Vimentin, Ki67, Her2, ER, PR). Moreover, the tumor models were implanted under the skin of a CD1 Nu/Nu immunosuppressed mice (females, 6 weeks old). Our results prove that both tumor cells and peritumoral cells proliferate within the bioprinted model tissues *in vivo* as well as *in vitro*.

We conclude that 3D bioprinting is suitable for fabricating human tissue models for assessing tumor progression. Future work will assess the sensitivity of the bioprinted tumor models to anticancer drugs.

Acknowledgments. The Romanian National Authority for Scientific Research funded a part of this work, project no. 100 PED/2017.

1. Zhang YS, Duchamp M et al., ACS Biomaterials Science & Engineering 2, 1710 (2016).
2. Asghar W, El Assal R et al. Materials Today 18(10), 539 (2015).
3. Zhao Y, Yao R et al., Biofabrication. 6, 035001 (2014).
4. Xu F, Celli J et al., Biotechnol. J. 6, 204 (2011).
5. Ling K, Huang G et al. Engineering. 1, 269 (2015).
6. Huang TQ, Qu X et al., Biomed. Microdevices. 16, 127 (2014).
7. Grolman JM, Zhang D et al., Adv. Mater. 27, 5512 (2015).

Physical analysis of west Pontus Euxinus Greek and Roman Pottery

M.C. Belc, T. Caliate, A. Mandes-Vaduva

Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania

This work presents results on the neutron characterization of amphorae from the Capidava fortress, Dobruja, Romania.

Capidava was an important Geto-Dacian center on the right bank of the Danube. After the Roman conquest, it became a civil and military center, as part of the province of Moesia Inferior, modern Dobruja.

Data reduction was carried out by identifying first the elements useful for discrimination purposes and then by submitting the data to cluster analysis. Amphorae are parted in many groups that are related to different workshops. The present study investigates more type of potteries, using enhanced and Cultural Heritage Research.

1. Clay Acquisition and Vessel Distribution Patterns: Neutron Activation Analysis of Late Windsor and Shantok Tradition Ceramics from Southern New England, Jonathan M. Lizee, Hector Neff, Michael D. Glascock *American Antiquity*, Vol. 60, No. 3 (Jul., 1995), pp. 515-530 Published by: Cambridge University Press
2. The origin of Aegean-like pottery from the Western Negev and Northern Sinai by Neutron Activation Analysis, Conference: 7th European Meeting on Ancient Ceramics (EMAC'03), Lisbon Oct. 27 - 31, 2003, Volume: Understanding people through their pottery, M. I. Prudencio, M. I. Dias, J. C. Waerenborgh (eds.), 151 - 156

Contributions to the matriceal proteins structure description in marine molluscs

M. C. Belc, M. Bratu A. Mandes-Vaduva, V. Dinca-Balan

Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania

Mollusks are soft-bodied animals and to protect themselves, during their evolution they elaborate an external calcified rigid structure, the shell.

The shell fabrication requires a specialized cellular mechanism, which are strictly under the control of many genes, which elaborates enzymes for the mineralization process. The calcium carbonate micro crystals that form the shell structure differ in their shape and size from their inorganically formed counterpart, and their shapes are generally complex. These crystals assemble according to different levels of hierarchy being synthesized under special microenvironment conditions. The entire process of shell construction is modulated by an extracellular organic matrix, a part of which is occluded in the shell during calcification.

Studies revealed that in the process of shell construction the formation of the organic framework precedes the crystallization of individual calcium carbonate tablets. Many quantitative analyses indicate that the organic moieties of the shell represent a minor fraction of the shell, between 0.01 and 5-weight %. Although these proportions are low, they influence crucially the mechanical properties of the associated crystals.

Rapana venosa is a marine gastropod widespread in the Black Sea. Its shell is built in very good quality of nacre, being very tough and resistant. *Mytilus galloprovincialis* (the mussel) is a marine bivalve also common in the Black Sea. Its shell is less resistant and thick than *Rapana*'s one.

Taking into account the remarkable mechanical resistance of the *Rapana venosa* shell given to the *Mytilus galloprovincialis* one, there must be differences concerning the microstructure of the two kind of shells.

To better understand these microstructures we submit shells from both organisms to a chemical demineralization process followed by preparation of the demineralized products for scanning electron microscopy.

Our results revealed differences of microstructure in the two organism's shells, which encourage us to continue our studies regarding the enzymatic properties of the matrix proteins in *Rapana venosa* shell.

1. I. C. Olson, R.Kozdon, J.W. Valley, P. U. P. A. Gilbert, J. Am. Chem. Soc. 134, 7351(2012)

2. F. Marin, N. Le Roy, B.Marie, Frontiers in Bioscience S4, 1099(2012)

3. S.Auzoux-Bordenave, A. Badou, B. Gaume, S. Berland, M-N. Helléouet, C. Milet, S. Huchette Journal of Structural Biology 171, 277(2010)

The dynamic electrical properties of $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ vivianite materials*S. Brândușoiu¹, I. Malaescu¹, C. N. Marin¹, M. Poienar², P. Vlăzan², P. Sfirloagă²*¹ *West University of Timișoara, Physics Faculty, 300223 Timisoara, România*² *National Institute Research & Development for Electrochemie & Condensed Matter, Timisoara, România*

The vivianite $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ is an iron phosphate with potential applications in soil fertilization [1] or for the prevention of chlorosis in limestone soils [2]. This compound crystallizes in the monoclinic structure (spatial group $C2/m$) with the following lattice parameters: $a = 10.08 \text{ \AA}$, $b = 13.43 \text{ \AA}$, $c = 4.70 \text{ \AA}$ and $\beta = 104.03^\circ$ [3]. The investigated material vivianit type was obtained by the co-precipitation method in the ultrasound field, and the physico-chemical properties were analyzed by X-ray diffraction (XRD), SEM-analysis and UV-VIS spectroscopy. The measurements of complex impedance ($Z = Z' + iZ''$) at various temperatures T , between 30°C and 220°C and over the frequency range $100 \text{ Hz} - 2 \text{ MHz}$ were also performed. Based on the complex impedance measurements, the dynamic electrical conductivity of the sample was computed. The conductivity spectrum, $\sigma(f)$ follows the Jonscher universal law [4] at each constant temperature. In the low frequency range, based on the temperature dependence of the electrical conductivity and using the variable-range-hopping (VRH) theoretical model, the frequency and temperature dependencies of the density of localized states near the Fermi level, $N(E_F)$, the hopping distance, R and the hopping energy, W were computed [5]. In the high frequency range, using the temperature dependence of the electrical conductivity and the correlated barrier hopping (CBH) theoretical model, the band gap energy of the sample, was determined [6].

1. J. Graftiav and M.F. Courtoy Ann Oembloux 25, 19 (1919).

2. A. Eynard et al, Fertilizer Research 31, 61 (1992).

3. H. Mori and T. Ito, Acta Cryst. 3, 1 (1950).

4. A. K. Jonscher, *Universal Relaxation Law*, 1st edn. (Chelsea Dielectrics Press, London), 198–200, (1996).5. I. Malaescu, A. Lungu, C. N. Marin, P. Sfirloaga, P. Vlazan, S. Brindusoiu, M. Poienar, *Ceramics International*, 44 (10), 11610 (2018).6. H. P. Pinto, A. Michalkova, J. Leszczynski, *J. Phys. Chem. C* 118, 6110 (2014).

Investigation of the MgSi Thin Films Properties Deposited by TVA Technology

V. Dinca-Balan, R. Vladoiu, A. Mandes-Vaduva, F. Geoshun

Ovidius University of Constanta, Constanta, Romania

Magnesium silicon thin films have been synthesized by Thermionic Vacuum Arc (TVA) technology, without using buffer gas to ignite the discharge. The aim of the study was to achieve the controlled synthesis of Mg and Si thin films from elemental grains of magnesium and silicon.

Magnesium is a rather strong, lightweight metallic material with two-thirds the density of aluminum and together with its alloys is required by the automotive, aerospace industries and for biomedical applications as temporary implants due to their biocompatibility and biodegradability. Even so, their applications are still limited because of the low corrosion resistance due to a high surface reactivity and low standard potential. Mg₂Si provide unique properties for anticorrosive coatings, and is an ecologically and economically profitable material for electronics.

The nanostructure of the thin films have been characterized by: Transmission Electron Microscopy (TEM), Scanning Electron Microscopy (SEM) accompanied with energy dispersive spectrometer and Free Surface Energy (FSE) by See System studies.

From the TEM and SAED measurements, the identified phases were as following: Mg (hexagonal), Mg₂Si (Cubic), Si (diamond) and MgO (Cubic). From the morphological point of view, MgSi/GI is polycrystalline, partial crystallized, with 6 nm diameter of the grains, according to the Debye-Scherrer relation.

Acknowledgements: CNDI-UEFISCDI, project INOVATECH 70/2017.

Magnetic particle inspection of materials for industrial applications

N. Holban, D. Petcu-Ilie, A. Mandes-Vaduva

Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania

The most promising non-destructive testing (NDT) methods for industrial applications include electrical resistivity testing, eddy current and magnetic bridge testing, magnetic particle inspection (MPI), ultrasonic testing, X-ray radiography, gas permeability testing, and gamma ray density determination.

The magnetic particle method is established since 80 years as a method for the testing of surface cracks in ferromagnetic material. The magnetic particle inspection is one of the most simple and most sensitive methods in NDT. This inspection method is used extensively to check for flaws in a large variety of manufactured materials and components. MPI is used to check materials such as steel bar stock for seams and other flaws prior to investing machining time during the manufacturing of a component. Critical automotive components are inspected for flaws after fabrication to ensure that defective parts are not placed into service. MPI is used to inspect some highly loaded components that have been in-service for a period of time. For example, many components of high performance race cars are inspected whenever the engine, drive train and other systems are overhauled. MPI is also used to evaluate the integrity of structural welds on bridges, storage tanks, and other safety critical structures.

The aim of this paper is to investigate components using a magnetic yoke built at the Ovidius University in the Non-Destructive Control Laboratory. The results obtained demonstrate the efficiency and accuracy of the newly built magnetic yoke.

Acknowledgement: Project RO--JINR 322/21.05.2018 item 90.

1. Sorabh, VaibhavRaghav, Shailesh s. Sengar, Materials Today: Proceedings 4 (2017).
2. H.Nakata, M.Hirata, T.Tada, IFAC Proceedings Volumes 26, 2 (1993).

The behaviour in time of low-ph modified cement based matrices used for embedding radioactive metallic aluminium waste

L. Ionascu, M. Nicu, F. Dragolici

“Horia Hulubei” National Institute of Physics and Engineering, Bucharest, Romania

Stabilization/immobilization of radionuclides in different materials, known as “radioactive waste conditioning” is one of the most important step in the management of radioactive waste. Even the many radioactive wastes can be conditioned in ordinary Portland or modified cements, there are some metallic radioactive wastes having a problematic behaviour in the paste cement system given by the chemical reactions at high pH mainly in the initial setting steps. Such important metallic radioactive wastes are pure aluminium and aluminium alloys having the passivation in the 4.5 ÷ 8.5 pH domains.

The aim of this paper is to assess the evolution of the macroscopic properties (strength, volume change) of the cement matrices as a function of time, and to correlate them with microstructural changes. This study proposes to highlight the structural and mechanical information regarding the interaction between aluminium with the major components of the low-pH cement based matrix at different period of time which are necessary for the medium and long term assessment of the safety and performance of Baita-Bihor Repository.

Synthesis and characterizations of magnesium-based composites obtained by Thermionic Vacuum Arc (TVA) technology

A. Mandes-Vaduva, V. Dinca-Balan, R. Vladoiu

Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania

Magnesium alloys have gained much attention for being some of the lightest structural materials around, but their inherent weakness has limited their use. One possible solution to improving the performance of magnesium in these conditions is alloying with other elements, especially C, Si, Ti and Zn alloys are considered among the most promising.

The aim of this paper is investigate the growth and structure properties of Mg-based composites thin films deposited by Thermionic Vacuum Arc (TVA) technology in one electron gun configuration on silicon and glass substrate. TVA method offer convincing advantages for multi-component depositions, such as: high rate of deposition, low thermal energy transfer, very stable discharge conditions, no cathode' impurities and very good adherence.

The properties of the deposited Mg-based composites were investigated in terms of wettability, morphology and tribology. The surface free energy was determined by means of Surface Energy Evaluation System indicating a hydrophobic character and the morphology were determined from BF-TEM image performed by Philips CM 120 ST TEM system. In addition, the thin films were characterized using Scanning Electron Microscopy with energy-dispersive X-ray detection (SEM/EDX).

Acknowledgement: This work was supported by a grant of the Romanian National Authority for Scientific Research, CNDI-UEFISCDI, project INOVATECH 70/2017.

1. A. Mandes, R. Vladoiu, V. Dinca, G. Prodan, IEEE Trans. Plasma Sci. 42, 2806 (2014).
2. R. Vladoiu, A. Mandes, V. Dinca-Balan, G. Prodan, P. Kudrna, M. Tichy, Plasma Sources Sci. Technol. 24 (2015).

The calculation of preserved quantities in the case of electromagnetic field using Noether's

M. T. D. Mot, C. Crucean

West University of Timișoara, Physics Faculty, Timisoara, România

This paper aims to present an analysis on the preserved sizes in the case of electromagnetic field using Noether's theorem.

In the first chapter we will start with a discussion about electrodynamics with the study of electrostatics, phenomena which involve charge distribution and invariant fields over time, also we will introduce concepts and methods which are important for further discussions and will present some essential mathematical techniques. We will deal with basic issues and with the deduction of Maxwell's equations, which describe the electromagnetic field behavior.

At the beginning are discussed the vectorial and scalar potentials, calibration transformations and Green functions for the wave equation. Then energy and momentum conservation laws and the properties of electromagnetic sizes transformation are treated.

In the next chapter we will talk about electromagnetic fields instead of electric or magnetic fields. The whole importance of the link between electric and magnetic fields as well as the essential resemblances become clear only in the frame of special relativity theory.

In chapter three, we will talk about Noether's theorem as well as about the Lagrangian density and preserved sizes with the help of this theorem.

In the last chapter, we will deal with the calculation of preserved quantities in the case of electromagnetic field using Noether's theorem in Gauge Lorentz and Gauge Coulomb, respectively.

1. D. Allan Bromley, Classical Electrodynamics, 1991.
2. Walter Greiner and Joachim Reinhardt, Field Quantization, Springer, 1996.
3. J.D. Jackson, A companion to Classical Electrodynamics, 2004.
4. H. Feshbach, Methods of theoretical physics, 1953.

The evolution in time of physico-chemical and mechanical properties of cement matrices containing secondary liquid radioactive waste

M. Nicu, L. Ionascu, F. Dragolici

“Horia Hulubei” National Institute of Physics and Engineering, Bucharest, Romania

The most accepted conditioning process in accordance with the actual international disposal requirements and respecting the waste acceptance criteria for the storage or/and safe disposal is concrete embedding.

The process implies the mixing of the radioactive waste with a binding material to convert the radioactive waste in a matrix environmentally acceptable from the radioactive safety point of view for interim storage and/or final disposal.

To respect waste acceptance criteria for disposal, the matrix must be stable in time from chemical, physical, mechanical and geometric point of view. The purpose of this paper is to obtain data on samples prepared with secondary liquid radioactive waste and cement, necessary for the approach the medium and long term assessment of the safety and performance for waste packages.

Magnetorheological Suspensions and Elastomers - Synthesis and Characterization

I. Bica¹, G. Pascu¹, M. Bunoiu¹, M. Balasoiu^{2, 3}

¹ West University of Timisoara, Timisoara, Romania

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³ "Horia Hulubei" National Institute of Physics and Engineering, Bucharest, Romania

Magnetorheological suspensions (MRSs) and magnetorheological elastomers (MREs) are active magnetic materials, consisting of a matrix in which magnetic particles are dispersed. As their mechanical and rheological properties are well controlled by applied magnetic fields, these materials are of interest in various applications.

Magnetorheological suspensions (MRSs) are composed from a liquid matrix into which magnetizable micro-particles are dispersed [1,2]. The liquid matrix contains a carrier liquid (e.g., polar oils, non-polar oils, or water) into which tensioactive substances or/and additives are introduced. The ordering of the micro-particles in a magnetic field has the effect of a drastic modification of the rheological properties, modification of the electrical conductivity, and modification of the thermal conductivity of the MRSs.

By introducing magnetic microparticles in an elastic matrix, materials whose properties can be modified in the presence of an external magnetic field can be fabricated (MREs) [3-7]. Unlike the MRSs, in which long-term particles deposition often occurs, the stability of the MREs is ensured by inserting the particles in/ between polymer chains.

In the present work, recent results on the synthesis and characterization of magnetorheological suspensions and elastomers are reviewed.

Acknowledgements. The work is accomplished in the frame of PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0871 Project (CNDI-UEFISCDI) and of the collaboration between JINR and the Romanian universities; RO-JINR Projects Nos. 323/21.05.2018 and 322/21.05.2018 item 71.

1. I. Bica, J. Ind. Eng. Chem. 13(2), 299 (2007).
2. I. Bica, M. Balasoiu, M. Bunoiu, I. Iordaconiu, Rom. Journ. of Phys. 61 (5-6) (2016).
3. I. Bica, Materials Letters 63, 2230 (2009).
4. I. Bica, J Ind Eng Chem 18, 1666 (2012).
5. M. Balasoiu, I. Bica, Results in Physics 6, 199 (2016).
6. M. Bunoiu, J. Neamtu, L. Chirigiu et al., Applied Surface Science 424 282 (2017).
7. M. Balasoiu, M. Bunoiu, L. Chirigiu et al., AIP Conference Proceedings 1916, 040007(7) (2017).

Ferromagnetic materials characterization using magnetometry methods

P. Popov

Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania

This paper presents some aspects of magnetic field measurements using magnetometry methods. These are generally used for measurement of the total magnetic field intensity or magnetic field components in any direction, in surveys aimed for: identifying iron ore deposits, geophysical and archaeological marine surveys and Unexploded Ordnance (UXO) detection. Their application in geophysical prospecting is based on the principle of measuring and recording deviations in the Earth's magnetic field caused by the presence of ferromagnetic material.

The requirement for high-resolution data in UXO detection has driven the development of analytical signal gradiometers and developments made in this field are likely to be of relevance to magnetometry surveys in maritime archaeological prospecting. During the latter half of the 20th Century, proton precession magnetometers were employed in magnetometry surveys.

Overhauser magnetometer type is an improved proton precession magnetometer that has recently begun to replace traditional instruments. The physical principle behind the operation of such devices is called the "Overhauser Effect" and consists of energy transfer from electrons to the protons in the hydrogen atoms. This is happening in a liquid rich in hydrogen atoms, like kerosene or methanol. In this case, the electrons are excited by a radio frequency (RF) signal, transferring their energy to the hydrogen atoms' nuclei (protons) and modifying their spin states. Once the RF signal is removed, the protons spiral back to their original alignment with the total magnetic field. Measuring this precession frequency with a coil and establishing the constant named "gyromagnetic ratio", the intensity of total magnetic field can be calculated.

The resultant precession signals have a higher signal-to-noise ratio than for a normal proton precession magnetometer. The performance of the Overhauser magnetometer reaches values of sensitivity about $0.015\text{nT}/\sqrt{\text{Hz}}$ with an absolute accuracy of $0.1\text{--}0.2\text{nT}$. The fact that the signals are non-decaying, means that the polarization and signal measurement occur simultaneously which obviously results in an increased sampling rate. Compared to the older proton precession magnetometers, whose operating principle is based on the excitation of protons by a DC source, Overhauser magnetometer type are more energy efficient, have faster cycling rates (up to five magnetic measurements per second), and higher sensitivity. The advantage of saving energy lies in the fact that these types of magnetometers can be mounted on platforms with limited battery power, thus improving the spatial coverage of magnetic mapping surveys.

All of these advantages have been highlighted by magnetic field measurements made in the Black Sea seaside area.

Structural and morphological properties of titanium based nanomaterials deposited by LTVA

R. Vladoiu, A. Mandes-Vaduva, V. Dinca-Balan

Ovidius University, Constanța, Romania

Multi-component titanium based nanocomposites owing to their remarkable properties of the coating surfaces such as wear resistance, roughness, low friction coefficients have been synthesized and investigated in different combination and forms.

A new approach in plasma technology design by implementing laser beams for producing advanced materials is reported by implementing the Laser-beam in the Thermionic Vacuum Arc plasma, applying the new technology: Laser induced Thermionic Vacuum Arc (LTVA) on Titanium based nanostructures. This new concept will use at maximum the offered performances by TVA technology and by Laser-beam effect.

For this reason, plasma/surface interactions and growth mechanisms have to be taken into account for the definition, evaluation and comparison of the different types of coating equipment and achievable coating results. The challenge of this work is to find the best combination for coating the mechanical parts of components by suitable complex nanocomposites and by using innovative technology.

Binary thin films as well as single thin films were deposited using Thermionic Vacuum Arc (TVA) technology. The thin films were characterized using scanning electron microscope (SEM, Zeiss EVO 50 SEM) accompanied with energy dispersive spectrometer and transmission electron microscope (TEM, Phillips CM 120 ST, 100 kV) and AFM. The film is composed of nanoparticles very smoothly distributed of 15-30 nanometer size embedded in amorphous matrix film, and by AFM analysis in AAC mode (acoustic AC mode, “tapping”). Roughness analysis using ISO standardization methods of TiCr reveals 1.11 nm Sa roughness.



SCIENCE

Список участников

SCIENCE

SCIENCE

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Abaszade Rashad Gabil	ANAS	Abaszada@gmail.com	161
Chudoba Dorota	ОИЯИ, AMU Poznan	dnn@amu.edu.pl	–
Elmekawy Ahmed Hassan	СПБГУ	ahmedalmekawy@ymail.com	–
Gutfreund Philipp	ILL		–
Ioffe Alexander	JCNS	a.ioffe@fz-juelich.de	–
Khalyavin Dmitry	ISIS Facility, Rutherford Appleton Laboratory	dmitry.khalyavin@stfc.ac.uk	44
Kraan Wicher Hooite	Retired from Delft Univ of Technology	whkraan@gmail.com	85
Mamedova Aynura Chingiz	Институт физики НАН Азербайджан	a.i.madadzada@gmail.com	197
Mezei Ferenc	The European Spallation Source		–
Nabiyev Asif Arasli	ОИЯИ, ANAS IRP Baku	asifnebi@gmail.com	163
Rajewska Aldona	Narodowe Centrum Badan Jadrowych	aldonar@jinr.ru	164
Recko Katarzyna	Faculty of Physics University of Bialystok	k.recko@uwb.edu.pl	–
Strobl Markus	Paul Scherrer Institut		–
Ukleev Viktor	Paul Scherrer Insitut	victor.ukleev@psi.ch	136
Zabel Hartmut	Ruhr-Universität Bochum		–
Абдурахимов Бехзоджон	ОИЯИ	behzodjon25@mail.ru	–
Абдулкадирова Нурижат Зулпикаровна	Институт физики ДНЦ РАН	nnurizhat@mail.ru	–
Авдеев Михаил Васильевич	ОИЯИ	avd@nf.jinr.ru	121
Агафонов Сергей Сергеевич	НИЦ КИ	agaph@mail.ru	167

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Азарова Любовь Александровна	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	loveazarova@gmail.com	24
Аккуратов Валентин Иванович	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	akkuratov.v@crys.ras.ru	147
Аксельрод Леонид Абрамович	НИЦ КИ – ПИЯФ	axselrod_la@pnpi.nrcki.ru	–
Аксенов Виктор Лазаревич	НИЦ КИ, ОИЯИ	aksenov@nf.jinr.ru	9
Аксенов Сергей Николаевич	ИЯИ РАН	axenov@inr.ru	–
Алигулиева Хаяла Вагиф	СумГУ	xayala-firuza@mail.ru	168
Алтынбаев Евгений Владимирович	НИЦ КИ - ПИЯФ	evgeniy.alt@mail.ru	45
Антропов Николай Олегович	ИФМ УрО РАН	nikolayantropovekb@gmail.com	–
Аргымбек Байболат	ОИЯИ	argymbek92@mail.ru	13
Артикульный Александр Петрович	ОИЯИ	artikulnyy@ukr.net	25
Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	14, 122
Балашою Мария Александровна	ОИЯИ	balas@jinr.ru	23
Бездетнова Алена	УрФУ	bezdetnova_alena@mail.ru	137
Белозерова Надежда Махмудовна	ОИЯИ	nmbelozeroва@mail.ru	15, 169
Бескровный Анатолий Иванович	ОИЯИ	beskr@nf.jinr.ru	–
Бобриков Иван Анатольевич	ОИЯИ	bobrikov@nf.jinr.ru	170
Бокучава Гизо Дазмирович	ОИЯИ	gizo@nf.jinr.ru	107

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Бондаренко Андрей Борисович	НИИ Гриппа	andrew.b.bondarenko@gmail.com	57
Борисова Полина Алексеевна	НИЦ КИ	Borisova_PA@nrcki.ru	123, 171
Брагинец Юлия Петровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	braginet_s_yp@pnpi.nrcki.ru	172
Булавин Максим Викторович	ОИЯИ		–
Быков Алексей Анатолевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	redi87@bk.ru	124
Быков Эдуард	НИЦ КИ – ПИЯФ	mcgector@yandex.ru	–
Вазина Альвина Андреевна	ИТЭБ РАН	vazina@mail.ru	–
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	148
Васильев Андрей Иванович	НИЦ КИ – ПИЯФ	aivasilev92@mail.ru	–
Васильев Дмитрий	ИМЕТ РАН	vasilyev-d@yandex.ru	173
Ваулин Артем Александрович	ИФМ УрО РАН	artavaulin@gmail.com	46
Воробьев Сергей Иванович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Vorobyev_SI@pnpi.nrcki.ru	–
Воронин Владимир Владимирович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Voronin_VV@pnpi.nrcki.ru	–
Воронин Владимир Иванович	ИФМ УрО РАН	voronin@imp.uran.ru	–
Гаврилов Сергей Викторович	НИЦ КИ – ПИЯФ	gavrilov_sv@pnpi.nrcki.ru	–
Гапон Игорь Васильевич	ОИЯИ	gapon@jinr.ru	138, 174
Глушкова Татьяна Ивановна	НИЦ КИ – ПИЯФ	glushkova_ti@pnpi.nrcki.ru	175
Голосовский Игорь Викторович	НИЦ КИ – ПИЯФ	golosovsky_iv@pnpi.nrcki.ru	47
Голубев Михаил Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	golubev_ma@pnpi.nrcki.ru	139

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Горемычкин Евгений Анатольевич	ОИЯИ	goremychkin@jinr.ru	100
Горшкова Юлия Евгеньевна	ОИЯИ	Yulia.Gorshkova@jinr.ru	26
Горюнов Семен Владимирович	ОИЯИ	goryunov@jinr.ru	35
Григорьев Сергей Валентинович	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru	86
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	n.a.grigorieva@spbu.ru	149
Губанова Надежда Николаевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	gubanova_nn@pnpi.nrcki.ru	140, 176
Губкин Андрей Федорович	ИФМ УрО РАН	agubkin@imp.uran.ru	43
Гурьянов Александр Михайлович	СамГТУ	gurjanovam@mail.ru	125
Дадинова Любовь Александровна	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	lubovmsu@mail.ru	59
Джабаров Сакин Гамид оглы	ОИЯИ	sakin@jinr.ru	178
Джепаров Фридрих Саламонович	НИЦ КИ - ИТЭФ	dzheparov@itep.ru	36, 37
Дорошкевич Александр Сергеевич	ОИЯИ	nelya_dor@mail.ru	126
Дубицкий Илья Семенович	НИЦ КИ – ПИЯФ	32167i@mail.ru	150
Дубовский Игнат	НИЦ КИ – ПИЯФ	dubovsky_im@pnpi.nrcki.ru	–
Дьячков Максим Вадимович	НИЦ КИ – ПИЯФ	maximonian@yandex.ru	179
Егоров Владимир Валерьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	egorov_vv@pnpi.nrcki.ru	–
Ежов Виктор Федорович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Ezhov_VF@pnpi.nrcki.ru	–
Ердаулетов Меир	ГУ «Дубна»	meyir2008@mail.ru	128

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Ермакова Александра Михайловна	ЮФУ	ermakova.alexandra.bk@mail.ru	16
Ёров Хурсанд Эльмуродович	МГУ	khursandy@gmail.com	180
Жакетов Владимир Дмитриевич	ОИЯИ	zhaketov@nf.jinr.ru	181
Жумаев Мустахим Рафиевич	БухИТИ	mrjumaev2011@mail.ru	–
Забродская Яна Александровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	zabrodsкая_я@pnpi.nrcki.ru	182
Захаров Максим Андреевич	ОИЯИ	maxcardinal@yandex.ru	38
Захарова Анна Владимировна	СПбГУ	annyy50@icloud.com	–
Зернин Николай Дмитриевич	ОИЯИ	nikolay-zernin@yandex.ru	–
Зобкало Игорь Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Zobkalo_IA@pnpi.nrcki.ru	87
Ившина Варвара Дмитриевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	ivshina_vd@pnpi.nrcki.ru	–
Ильин Дмитрий Сергеевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	digatchi@list.ru	–
Ипатов Дмитрий Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	dmitrii.ipatov@rambler.ru	–
Исакова Наталья Николаевна	НИЦ КИ	nnisakova@mail.ru	183
Калюканов Андрей Игоревич	НИЦ КИ	kalyukanov@mail.ru	184
Каптелинин Святослав Юрьевич	ЮФУ	scaptelinin@yandex.ru	151
Карпец Максим Леонидович	КНУ	karpetsmax@gmail.com	141
Карпов Иван Дмитриевич	НИЦ КИ	idkarpov@yandex.ru	108, 185
Киреенко Юрий Михайлович	НИЦ КИ – ПИЯФ	osnerde@gmail.com	–
Киселев Игорь Анатольевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	kiselev_ia@pnpi.nrcki.ru	104

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Киселев Михаил Алексеевич	ОИЯИ	kiselev@jinr.ru	60
Кичанов Сергей Евгеньевич	ОИЯИ	ekich@nf.jinr.ru	109
Клементьев Евгений Станиславович	БФУ	EKlementev@kantiana.ru	17
Ковалев Анатолий Васильевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	kovalev_av@pnpi.nrcki.ru	88
Коваленко Екатерина Сергеевна	НИЦ КИ	kovalenko_es@mail.ru	–
Коваленко Никита	НИЦ КИ – ПИЯФ	kovalenko.nrcki@gmail.com	186
Кожевников Сергей Васильевич	ОИЯИ	kozhevn@nf.jinr.ru	89
Козленко Денис Петрович	ОИЯИ	denk@nf.jinr.ru	79
Козлова Алена Сергеевна	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	alreszensia.future@yandex.ru	71
Конарев Петр Валерьевич	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	konarev@ns.crys.ras.ru	187
Коник Петр Иванович	НИЦ КИ – ПИЯФ	104pet104@gmail.com	–
Кононихина Виктория Витальевна	HZG	VictoriaKononikhina@gmail.com	–
Коноплев Кир Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	konoplyev_ka@pnpi.nrcki.ru	188
Копица Геннадий Петрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	kopitsa_gp@pnpi.nrcki.ru	27, 189
Кормазева Екатерина Сергеевна	НИЦ КИ	ekaterinakormazeva@gmail.com	28
Коршунов Артем	НИЦ КИ – ПИЯФ	artem.koshunov91@gmail.com	90
Косячкин Егор Николаевич	КНУ	kosiachkin@gmail.com	142
Кравцов Евгений Алексеевич	ИФМ УрО РАН	kravtsov@imp.uran.ru	–

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Крившич Анатолий Григорьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	krivshich_ag@pnpi.nrcki.ru	–
Круглов Александр Александрович	ОИЯИ	obis@list.ru	190
Кузнецов Валерий Леонидович	ИЯИ РАН	kuvale@gmail.com	191
Кузнецов Игорь Алексеевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	kuznetsov_ia@pnpi.nrcki.ru	–
Кузнецова Евгения Васильевна	ИЯИ РАН	evgenia@inr.ru	192
Куклин Александр Иванович	ОИЯИ	kuklin@nf.jinr.ru	55
Кулевой Тимур	НИЦ КИ - ИТЭФ	kulevoy@itep.ru	–
Куликов Антон Геннадьевич	НИЦ КИ	ontonic@gmail.com	152
Кульвелис Юрий Викторович	НИЦ КИ – ПИЯФ	kulvelis_yv@pnpi.nrcki.ru	193
Курбаков Александр Иванович	НИЦ КИ – ПИЯФ	kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru	48
Кучугура Мария Дмитриевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	mariya_kuchugura@mail.ru	18
Ласица Михаил Владимирович	НИЦ КИ – ПИЯФ	mishlas1@gmail.com	194
Лебедев Василий Тимофеевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	lebedev_vt@pnpi.nrcki.ru	29, 110
Лебедев Дмитрий Витальевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	dtry@omrb.pnpi.spb.ru	61
Литвин Василий Сергеевич	ИЯИ РАН	vlitvin@inr.ru	111
Лихолетова Елена Сергеевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	likholetova_es@pnpi.nrcki.ru	–
Лукин Евгений Валерьевич	ОИЯИ	lukin@jinr.ru	112
Львов Дмитрий Владимирович	НИЦ КИ - ИТЭФ	lvov@itep.ru	72
Магницкая Мария Викторовна	ИФВД РАН	magnma@yandex.ru	195

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Майсузенко Дмитрий Андреевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	maisuzenko_da@pnpi.nrcki.ru	–
Максимов Вениамин Игоревич	ИФМ УрО РАН	maximov@imp.uran.ru	19, 196
Малеев Сергей Владимирович	НИЦ КИ – ПИЯФ		–
Марин Виктор Николаевич	ИЯИ РАН	marin@inr.ru	198
Маслова Варвара Андреевна	ОИЯИ	Varya.Maslova@yandex.ru	199
Матвеев Василий Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	matveev_va@pnpi.nrcki.ru	143
Матвеева Анна Николаевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	matveeva_an@pnpi.nrcki.ru	91
Махмудов Хайрулло	ФТИ РАН	h.machmoudov@mail.ioffe.ru	129
Меньчиков Ян Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	menchikov96@list.ru	–
Мирон Николай Федорович	НИЦ КИ	mironnf@gmail.com	–
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	a.mistonov@spbu.ru	49
Митропольский Иван Андреевич	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	Mitropolsky_IA@pnpi.nrcki.ru	–
Молчанов Вячеслав Сергеевич	МГУ		–
Мурашев Михаил Михайлович	НИЦ КИ	mihail.mmm@inbox.ru	130, 200, 201
Мухаметулы Багдаулет	ОИЯИ, КазНУ	bagdaulet_m@mail.ru	202
Назаров Куаныш	ОИЯИ	knazarov@jinr.ru	131
Никитенко Юрий Васильевич	ОИЯИ	nikiten@nf.jinr.ru	–
Никова Екатерина Сергеевна	ИФМ УрО РАН	e.nikova@mail.ru	203
Николаев Илья Игоревич	СПбГУ	iljanikolaevstorm@mail.ru	–

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Овсяников Александр Константинович	НИЦ КИ – ПИЯФ	ovsyanikov_a_k@mail.ru	–
Огнев Алексей Вячеславович	ДВФУ	ognevav@gmail.com	204
Окороков Алексей Иванович	НИЦ КИ – ПИЯФ	okorokov_ai@pnpi.nrcki.ru	–
Павлов Константин	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	orbital.pk@lns.pnpi.spb.ru	80
Паршин Петр Петрович	НИЦ КИ	neupar45@yandex.ru	20
Петрова Анита Олеговна	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	ani_petrova@mail.ru	–
Петухов Максим Владимирович	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	maxim@embl-hamburg.de	62
Плешанов Николай Константинович	НИЦ КИ – ПИЯФ	pleshanov_nk@pnpi.nrcki.ru	113
Подурец Константин Михайлович	НИЦ КИ	podurets@yandex.ru	153
Попов Евгени Петров	ОИЯИ	evpetropov@abv.bg	–
Поташев Станислав Ильич	ИЯИ РАН	potashev@inr.ru	114
Прокопович Павел Аликович	БФУ	p.a.prokopovich@gmail.com	205
Проскурнина Наталья Владимировна	ИФМ УрО РАН	proskurnina@imp.uran.ru	206
Пустовойт Полина Марковна	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	polinapus@mail.ru	207
Пшеничный Кирилл Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	pshcyrill@mail.ru	92
Рувинская Екатерина Егоровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	ruvinskaia.e.e@mail.ru	–
Рунов Владимир Владимирович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Runov_vv@pnpi.nrcki.ru	–

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Руткаускас Антон Владимирович	ОИЯИ	ranton@nf.jinr.ru	50
Рыжов Вячеслав Анатольевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	ryzhov_va@pnpi.nrcki.ru	31
Рылов Сергей Александрович	НИЦ КИ	rylovsergey25@gmail.com	208
Рябухина Марина	ИФМ УрО РАН	ryabukhina@imp.uran.ru	209
Савенко Борис Николаевич	ОИЯИ	savenko@nf.jinr.ru	210
Савченков Павел Сергеевич	НИЯУ «МИФИ»	savch92@gmail.com	101
Садилов Валентин Викторович	ГУ «Дубна»	sadilov.valentin@mail.ru	115
Садыков Равиль Асхатович	ИЯИ РАН	rsadykov@inr.ru	116
Саламатин Денис Александрович	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	211
Семенихин Сергей Юрьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	semenikhin_sy@pnpi.nrcki.ru	212
Серебреников Дмитрий Александрович	БФУ	dimafania@mail.ru	102
Сёмкин Михаил Александрович	УрФУ	m.a.semkin@urfu.ru	51
Сжогина Алина Александровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	szhogina_aa@pnpi.nrcki.ru	–
Сиколенко Вадим Витальевич	ОИЯИ	sikolen@jinr.ru	103
Ситников Алексей Леонидович	НИЦ КИ – ИТЭФ	aleksey.sitnikov@itep.ru	81
Сканченко Дарья Олеговна	НИЦ КИ – ПИЯФ	skanchenko_do@pnpi.nrcki.ru	213
Смыслов Руслан Юрьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	urs1968@gmail.com	56
Сороколетов Дмитрий Сергеевич	ИЯФ СО РАН	nightspirit2010@yandex.ru	73
Столяров Андрей Андреевич	ИЯИ РАН	AStoljarov@inr.ru	154

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Сумников Сергей Викторович	ОИЯИ	Sumnikovsv@gmail.com	–
Сулопарова Анна	НИЦ КИ – ПИЯФ, СПбГУ	susloparovanna@mail.ru	52
Суясова Марина Вадимовна	НИЦ КИ – ПИЯФ	suyasova_mv@pnpi.nrcki.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	НИЦ КИ – ПИЯФ	syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru	93, 214, 215
Сырых Геннадий Федорович	НИЦ КИ	dyproso2011@mail.ru	166
Тавторкина Татьяна Андреевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	Jiatta@yandex.ru	–
Тарнавич Владислав Валерьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	tarnavich@gmail.com	94
Талыфлы Айсель Физули	СумГУ	talibli_aysel@mail.ru	216
Тимофеев Виктор Евгеньевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	timofeeviktor@gmail.com	74
Титов Анатолий Игоревич	НИЦ КИ – ПИЯФ	titov_ai@pnpi.nrcki.ru	217
Топерверг Борис Павлович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Boris.Toperverg@RUB.de	135
Трунов Дмитрий Николаевич	ИЯИ РАН	redmitr@yandex.ru	117, 218
Тюлюсов Антон Николаевич	НИЦ КИ – ИТЭФ	yulyusov@yandex.ru	219
Удовский Александр Львович	ИМЕТ РАН	udovsky@imet.ac.ru	220
Ульянов Владимир Александрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	ulyanov_va@pnpi.nrcki.ru	221
Урусова Наталья Вадимовна	УрФУ	natalia.urusova@urfu.ru	222
Усманов Олег Вадимович	НИЦ КИ – ПИЯФ	usmanow@mail.ru	–
Франк Александр Ильич	ОИЯИ	frank@nf.jinr.ru	39

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Цвигун Наталья Викторовна	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	n_tsvigun@mail.ru	32
Цыпильников Андрей Васильевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	andrei.tsypilnikov92@gmail.com	75
Черемных Таисия Александровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	cheremnykh_ta@pnpi.nrcki.ru	63
Черненко Юрий Петрович	НИЦ КИ – ПИЯФ	Chernenkov_YP@pnpi.nrcki.ru	–
Чижиков Вячеслав Анатольевич	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	chizhikov@crys.ras.ru	76
Чубова Надежда Михайловна	НИЦ КИ – ПИЯФ	chubova_nm@pnpi.nrcki.ru	95
Чупраков Игорь	ОИЯИ	nitro-chupa@mail.ru	162
Шагинян Василий Робертович	НИЦ КИ – ПИЯФ	vrshag@thd.pnpi.spb.ru	165
Шаймерденов Асет	ИЯФ СО РАН	aashaimerdenov@gmail.com	–
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	shapiro@mail.ru	40
Шарапова Татьяна Валерьевна	ДИТИ НИЯУ «МИФИ»	tatyana.starckina2010@yandex.ru	223
Шарипов Мирзо Зокирович	БухИТИ	m.z.sharipov@rambler.ru	–
Швалева Мария Александровна	НИЦ КИ – ПИЯФ	shvaleva_ma@pnpi.nrcki.ru	–
Швецов Алексей Валерьевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	shvetsov_av@pnpi.nrcki.ru	64
Шкорняков Сергей Михайлович	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	shkornyakov@mail.ru	224
Шмайсер Йоханн	НИЦ КИ – ИТЭФ	vny007@mail.ru	118
Шмаков Александр Николаевич	ИК СО РАН	A.N.Shmakov@inp.nsk.su	225
Шматко Валентина Анатольевна	ЮФУ	shmatko86@mail.ru	156

ФИО	Организация	e-mail	Стр.
Шмидт Александр Евгеньевич	НИЦ КИ – ПИЯФ	schmidt@omrb.pnpi.spb.ru	65
Штыкова Элеонора	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	viwopisx@yahoo.co.uk	10
Шушунов Михаил Николаевич	НИЦ КИ	viggenin@yandex.ru	226
Щелкачев Николай Михайлович	ИФВД РАН		99
Эм Вячеслав Терентьевич	НИЦ КИ	vtem9@mail.ru	82, 132
Юзвюк Мария	НИЦ КИ – ПИЯФ	yuzvyuk_mh@pnpi.nrcki.ru	157
Яковенко Екатерина Владимировна	НИЦ КИ	eyakovenko@list.ru	227
Яшина Екатерина Геннадьевна	НИЦ КИ – ПИЯФ	yashina_91@inbox.ru	67