ОРГАНИЗАТОРЫ:

Национальный комитет кристаллографов России

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН

2016

1 РОССИЙСКИЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ КОНГРЕСС

ПЕРВЫЙ РОССИЙСКИЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ КОНГРЕСС

От конвергенции наук к природоподобным технологиям

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНГРЕССА
М.В. Ковальчук

Москва, ВДНХ
21–26 ноября 2016 г.

Национальный комитет кристаллографов России

Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»

Федеральный научно-исследовательский центр
«Кристаллография и фотоника» РАН

Сборник тезисов
Первого Российского кристаллографического конгресса

21 – 26 ноября 2016

г. Москва

Организаторы:

Национальный комитет кристаллографов России

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН

Партнеры:

Министерство образования и науки

Российский фонд фундаментальных исследований

Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»

Объединенная Судостроительная Корпорация

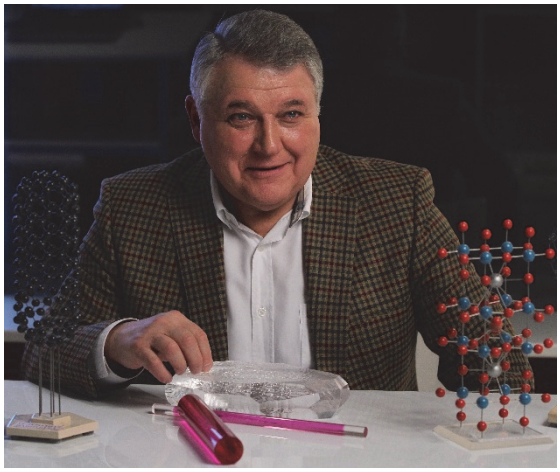
Правительство Москвы

European Synchrotron Radiation Facility

Спонсоры:

Компания ОПТЭК

ТехноИнфо



Уважаемые коллеги, дорогие друзья!

Приветствую вас на Первом Российском кристаллографическом конгрессе.

Кристаллография за 100 лет прошла сложный и интересный путь в своем развитии – от описательной минералогии, через химию, химический анализ, новую линию роста кристаллов, к физике в виде рентгеноструктурного анализа, физического материаловедения, а затем и к биологии, белковой кристаллографии. Собственно, отсчет развития современной кристаллографии начинается с открытия рентгеновской дифракции. Именно благодаря рентгеновскому излучению мы смогли увидеть сложное, трехмерное, периодическое строение всех окружающих нас материалов.

Первый этап развития кристаллографии был связан с копированием природных структур и процессов, что заложило основу промышленных технологий искусственного роста кристаллов. Уже в первые годы развития Института кристаллографии была заложена идеология научного развития, базирующаяся на триаде «рост – структура свойства» и подразумевающая глубокую взаимную связь между этими понятиями. Второй этап включал в себя развитие методов структурного анализа, изучение структуры кристаллов этими методами и переход к изучению биоорганических кристаллов. Следующий этап, который мы переживаем в настоящее время, – это качественный переход:

– от кристаллов к неструктурированным средам и живым системам;

– от макрообъектов к микро- и нанообъектам;

– от трехмерных к двумерным и одномерным структурам;

– от дифракции к недифракционным методам.

Методология развития кристаллографии такова, что она прошла путь от подражания природе к искусственному конструированию объектов, не имеющих аналогов в природе. Из узкоспециализированной минералогии кристаллография стала сложной междисциплинарной наукой. Суть ее в сочетании возможностей и достижений геологии, химии, физики, а на следующем этапе и биологии. Такой междисциплинарный подход стал методологией науки XXI века, когда сложение достижений сразу многих дисциплин дает прорыв и принципиально новый результат.

Сегодня мы достигли той стадии, когда дальнейшее развитие науки, образования, промышленности возможно только на междисциплинарной основе, конвергенции, взаимопроникновении наук и технологий, ведь сама природа конвергентна по своей сути. Такой междисциплинарный симбиоз нанотехнологических подходов с достижениями молекулярной биологии, биоинженерии, генной инженерии, информационных технологий, когнитивных и социогуманитарных наук становится базой для развития конвергентных нано-, био, информационных, когнитивных и социогуманитарных НБИКС-технологий.

НБИКС-технологии позволят создавать антропоморфные технические системы, подобные конструкциям, создаваемым живой природой. Будут разработаны гибридные нанобиосенсорные системы, биоробототехнические системы на основе технологий атомно-молекулярного конструирования и самоорганизации.

Кристаллография, с ее междисциплинарной сущностью, будет играть крайне важную роль в развитии конвергентных наук и создании природоподобной техносферы в XXI веке.

Желаю успешной работы участникам Конгресса!

Председатель Конгресса,
председатель Национального комитета кристаллографов России,
президент НИЦ «Курчатовский институт»
член-корреспондент РАН, профессор М.В. Ковальчук

Председатель Конгресса
Ковальчук М.В. (НИЦ КИ, Москва)

Ученый секретарь Конгресса
Дьякова Ю.А. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Сопредседатели Оргкомитета
Каневский В.М. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Панченко В.Я. (РФФИ, Москва)

Ученый секретарь Оргкомитета
Алексеева О.А. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Оргкомитет
Алдошин С.М. (ИПХФ РАН, Черноголовка)
Алфимов М.В. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Асеев А.Л. (СО РАН, Новосибирск)
Балега Ю.Ю. (САО РАН, Нижний Архыз)
Глико А.О. (ИФЗ РАН, Москва)
Зелёный Л.М. (ИКИ РАН, Москва)
Кашкаров П.К. (МГУ, Москва)
Квардаков В.В. (НИЦ КИ, Москва)
Кведер В.В. (ИФТТ РАН, Черноголовка)
Кирпичников М.П. (МГУ, Москва)
Колачевский Н.Н. (ФИАН, Москва)
Кульчин Ю.Н. (ИАПУ ДВО РАН, Владивосток)
Мазуренко С.Н. (ОИЯИ, Дубна)
Матвеев В.А. (ОИЯИ, Дубна)
Нарайкин О.С. (НИЦ КИ, Москва)
Огородова Л.М. (Министерство образования и науки РФ, Москва)
Пархоменко Ю.Н. (НИТУ «МИСиС», Москва)
Першуков В.А. (Госкорпорация «Росатом», Москва)
Попов В.О. (ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва)
Пущаровский Д.Ю. (МГУ, Москва)
Рабаданов М.Х. (ДГУ, Махачкала)
Романовский М.Ю. (ФАНО, Москва)
Рощупкин Д.В. (ИПТМ РАН, Черноголовка)
Садовничий В.А. (МГУ, Москва)
Свинаренко А.Г. (Фонд инфраструктурных и образовательных программ, Москва)
Синяшин О.Г. (ИОФХ КазНЦ РАН, Казань)
Сойфер В.А. (СамГУ, Самара)
Филиппов В.М. (РУДН, Москва)
Цыб С.А. (Министерство промышленности и торговли, Москва)
Чарушин В.Н. (ИОС УрО РАН, Екатеринбург)
Чупрунов Е.В. (ННГУ, Нижний Новгород)
Яцишина Е.Б. (НИЦ КИ, Москва)

Председатель Локального оргкомитета
Алтынбаев А.В. (НИЦ КИ, Москва)

Сопредседатели Программного комитета

Волошин А.Э. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Чвалун С.Н. (НИЦ КИ, Москва)

Ученый секретарь программного комитета

Марченкова М.А. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Программный комитет

Секция 1. Современная кристаллография

Аксёнов В.Л. (ОИЯИ, Дубна)
Антипов Е.В. (МГУ, Москва)
Асланов Л.А. (МГУ, Москва)
Болотина Н.Б. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Емельченко Г.А. (ИФТТ РАН, Черноголовка)
Жариков Е.В. (РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва)
Зубкова Н.В. (МГУ, Москва)
Кривовичев С.В. (СПбГУ, Санкт-Петербург)
Латышев А.В. (ИФП СО РАН, Новосибирск)
Лозовик Ю.Е. (ИСАН, Троицк)
Лысенко К.А. (ИНЭОС РАН, Москва)
Макарова И.П. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Простомолотов А.И. (ИПМех РАН, Москва)
Пущаровский Д.Ю. (МГУ, Москва)
Толбанов О.П. (НИ ТГУ, Томск)
Троян И.А. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Фёдоров П.П. (ИОФ РАН, Москва)

Секция 2. Методы и техника структурных исследований

Авилов А.С. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Авдеев М.В. (ОИЯИ, Дубна)
Асадчиков В.Е. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Благов А.Е. (НИЦ КИ, Москва)
Васильев А.Л. (НИЦ КИ, Москва)
Григорьев С.В. (СПбГУ, Санкт-Петербург)
Носик В.Л. (НИЦ КИ, Москва)
Пунегов В.И. (Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар)
Фейгин Л.А. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Чуев М.А. (ФТИАН, Москва)
Чхало Н.И. (ИФМ РАН, Нижний Новгород)

Секция 3. Кристаллография в биологии и медицине

Баграташвили В.Н. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Габибов А.Г. (ИБХ РАН Москва)
Кирпичников М.П. (МГУ, Москва)
Куранова И.П. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Новикова Н.Н. (НИЦ КИ, Москва)
Попов В.О. (ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва)
Прохорчук Е.Б. (ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва)
Самыгина В.Р. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Саранцева С.В. (ПИЯФ НИЦ КИ, Санкт-Петербург)
Штыкова Э.В. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Секция 4. Кристаллография и когнитивные исследования

Величковский Б.М. (МГУ, НИЦ КИ, Москва)
Демин В.А. (НИЦ КИ, Москва)
Зинченко Ю.П. (МГУ, Москва)
Казанцев В.Б. (ННГУ, Нижний Новгород)
Ушаков Д.В. (МГППУ, Москва)
Черниговская Т.В. (СПбГУ, Санкт-Петербург)

Секция 5. Кристаллографические методы в гуманитарных науках

Дэвлет Е.Г. (ИА РАН, Москва)
Макаров Н.А. (ИА РАН, Москва)
Питеря Ю.В. (ГМИИ им. А.С. Пушкина, Москва)
Ретивов В.М. (НИЦ КИ, Москва)
Смекалова Т.Н. (КФУ им. В.И. Вернадского, Симферополь)
Терещенко Е.Ю. (НИЦ КИ, Москва)
Шишлина Н.И. (ГИМ, Москва)
Яцишина Е.Б. (НИЦ КИ, Москва)

Секция 6. Образовательные аспекты современной кристаллографии

Болдырева Е.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)
Кашкаров П.К. (МГУ, Москва)
Менушенков А.П. (НИЯУ МИФИ, Москва)
Овчинникова Е.Н. (МГУ, Москва)
Пущаровский Д.Ю. (МГУ, Москва)
Филиппов В.М. (РУДН, Москва)

Микросимпозиум 1. Фотоактивные материалы и фотовольтаические структуры

Громов С.П. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Пономаренко С.А. (ИСПМ РАН, Москва)

Микросимпозиум 2. Сверхпроводники и сверхпроводящие структуры

Круглов В.С. (НИЦ КИ, Москва)
Любутин И.С. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Микросимпозиум 3. Структурные аспекты аддитивных технологий

Каблов Е.Н. (ФГУП ВИАМ, Москва)
Панченко В.Я. (РФФИ)

Микросимпозиум 4. Керамика, композиционные и гибридные материалы

Орыщенко А.С. («ЦНИИ КМ «Прометей» НИЦ КИ, Санкт-Петербург)
Чвалун С.Н. (НИЦ КИ, Москва)

Микросимпозиум 5. Химически- и радиационно-стойкие материалы

Санду Р.А. (ФГУП ИРЕА НИЦ КИ, Москва)
Штромбах Я.И. (НИЦ КИ, Москва)

Микросимпозиум 6. Материалы для детекторов и сенсоров

Егорычев В.Ю. (НИЦ КИ, Москва)
Писаревский Ю.В. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)

Микросимпозиум 7. Метаматериалы и фотонные кристаллы

Казанский Н.Л. (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва)
Кашкаров П.К. (МГУ, Москва)

Микросимпозиум 8. Меганаука. Состояние и перспективы. Российское измерение

Ковальчук М.В. (НИЦ КИ, Москва)
Матвеев В.А. (ОИЯИ, Дубна)

Содержание

Пленарные доклады 9

Секция 1. Современная кристаллография 17
Устные доклады 19
Стендовые доклады 52

Секция 2. Методы и техника структурных исследований 115
Устные доклады 117
Стендовые доклады 148

Секция 3. Кристаллография в биологии и медицине 195
Устные доклады 197
Стендовые доклады 227

Секция 4. Кристаллография и когнитивные исследования 265
Устные доклады 267
Стендовые доклады 276

Секция 5. Кристаллографические методы в гуманитарных науках 277
Устные доклады 279
Стендовые доклады 290

Секция 6. Образовательные аспекты современной кристаллографии 295
Устные доклады 297

Микросимпозиум 1. Фотоактивные материалы и фотовольтаические структуры 305
Устные доклады 307
Стендовые доклады 313

Микросимпозиум 2. Сверхпроводники и сверхпроводящие структуры 323
Устные доклады 325
Стендовые доклады 331

Микросимпозиум 3. Структурные аспекты аддитивных технологий 341
Устные доклады 343
Стендовые доклады 348

Микросимпозиум 4. Керамика, композиционные и гибридные материалы 349
Устные доклады 351
Стендовые доклады 365

Микросимпозиум 5. Химически- и радиационно-стойкие материалы 385
Устные доклады 387
Стендовые доклады 391

Микросимпозиум 6. Материалы для детекторов и сенсоров 393
Устные доклады 395
Стендовые доклады 404

Микросимпозиум 7. Метаматериалы и фотонные кристаллы 415
Устные доклады 417
Стендовые доклады 424

Микросимпозиум 8. Меганаука. Состояние и перспективы. Российское измерение 429
Устные доклады 431

Алфавитный указатель авторов 439

Пленарные доклады

СТРУКТУРНЫЙ ДИЗАЙН МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Антипов Е.В.
Химический факультет, Московский государственный университет, Москва 119991, Россия
email: evgeny.antipov@gmail.com

Источником около 90% использующейся в настоящее время энергии является ископаемое топливо, что имеет очень серьезные последствия: быстрое исчерпание природных ресурсов, существенный экологический ущерб и прогнозируемое изменение климата. Поэтому актуальной задачей является разработка и развитие возобновляемых источников энергии и одновременно с этим создание эффективных многоразовых накопителей энергии, что позволит существенно уменьшить потребление природных ресурсов в будущем.

Li-ионные аккумуляторы, изначально разработанные для портативных переносных устройств, уже сейчас находят применение в качестве стационарных накопителей энергии, в электромобилях и др. В настоящее время стремительно развиваются исследования в области Na-ионных аккумуляторов, которые обладают целым рядом значимых преимуществ по сравнению с литий-ионными. Для удовлетворения потребностей существующих и, особенно, новых применений, материалы Li- и Na-ионных аккумуляторов нуждаются в существенном улучшении их удельных энергетических параметров, безопасности и стоимости.

В докладе будет представлен обзор различных типов катодных материалов для Li(Na)-ионных аккумуляторов с особым акцентом на роль кристаллографии в их создании и оптимизации важных для практического использования свойств.

КУРЧАТОВСКИЙ СИНХРОТРОННО-НЕЙТРОННЫЙ КОМПЛЕКС. ОТ КЛАССИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ К ПРИРОДОПОДОБНЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ

Ковальчук М.В., Благов А.Е.
НИЦ «Курчатовский институт»
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: blagov_ae@nrcki.ru

Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований – одно из немногих мест в мире, где исследовательский реактор и синхротрон сосредоточены на единой площадке. Уникальное сочетание их экспериментальных возможностей позволяет добиться принципиально нового качества фундаментальных и прикладных исследований. Комбинация МЕГА-установок в НИЦ КИ представляет собой ядро, вокруг которого успешно развивается Курчатовский НБИКС-центр – центр конвергенции наук и технологий, объединяющий в себе нано-, био-, инфо-, когнитивные и социо-гуманитарные науки, представляющие собой фундамент адекватного восприятия и воспроизведения систем и процессов живой природы. Это делает МЕГА-установки Курчатовского института важным исследовательским инструментом для формирования качественно новой техносферы, которая станет органичной частью природы.

Специализированный источник синхротронного излучения (СИ) [1] был открыт 1 октября 1999г. В после глубокой модернизации, проведенной в 2007 - 2009 годах Курчатовский синхротрон снова приступил к регулярной работе и сейчас является единственным в России специализированным источником СИ, не уступающий по своим параметрам, ведущим зарубежным источникам соответствующего поколения.

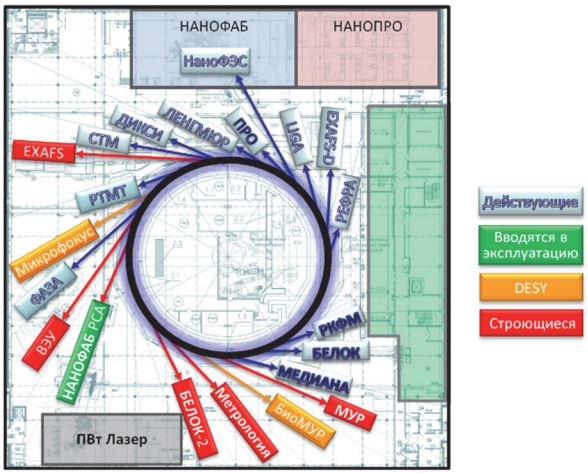


Рис. 1. Схема экспериментального зала синхротрона и план развития экспериментальных станций на последующие годы.

На рис. 1. приведён план современного, существенно расширенного в 2009 году, экспериментального зала синхротрона. В настоящее время функционируют 16 экспериментальных станций, 4 из которых представляют собой последнее поколение станций, разработанных в 2014-2015 годах в НИЦ КИ при сотрудничестве с ведущими мировыми производителями синхротронного оборудования [2]. Готовятся к вводу в эксплуатацию еще 7 новых станций,

и до 2020 года все оставшиеся станции должны пройти глубокую модернизацию.

Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8 позволяет осуществить комплексные исследования с помощью нейтронов и гамма-излучения в широком диапазоне длин волн с помощью различных методик. В 2010-2012 была проведена модернизация основных систем реактора, включая модернизацию активной зоны, что позволило продлить срок его эксплуатации до 2027 г и существенно увеличить поток нейтронов. Сейчас на реакторе функционируют 7 экспериментальных станций.

Исследовательская инфраструктура Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований охватывает все основные современные методы структурной диагностики, включая дифрактометрию, спектроскопию и визуализацию. И с точки зрения структурных исследований на Курчатовском синхротронно-нейтронном комплексе пройден путь методического развития от решения задач классической кристаллографии до задач конвергентных наук и природоподобных технологий – задач по изучению структуры биологических и гибридных объектов, материалов и устройств, исследованию когнитивных вопросов и культурологических проблем развития техносферы.

В докладе будет представлен обзор экспериментальных возможностей станций Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований: параметры пучков, реализуемые методики, приборное оснащение. Будут представлены результаты исследований и рассмотрены вопросы организации доступа пользователей: от составления и подачи заявки на эксперимент до выполнения измерений.

[1] М. В. Ковальчук, В. В. Квардаков, В. Н. Корчуганов / КИСИ вчера, сегодня, завтра // Природа. - 2013. - № 12

[2] Я.В. Зубавичус, Э.Х. Мухамеджанов, Р.А.Сенин / Экспериментальные станции КИСИ // Природа. - 2013. - № 12

ДЕФЕКТЫ В НЕОРГАНИЧЕСКИХ И БИООРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ: СХОДСТВО И РАЗЛИЧИЯ

Волошин А.Э.[1], Баскакова С.С.[1], Руднева Е.Б.[1], Маноменова В.Л.[1], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

voloshin@ns.crys.ras.ru

Благодаря развитию экспериментальной техники за последние 25-30 лет получены многочисленные экспериментальные данные об элементарных процессах роста как неорганических кристаллов, так и кристаллов белков, которые демонстрируют не только их сходство, но и применимость для них одних и тех же теоретических представлений. Однако образование дефектов при росте из растворов до сих пор изучено не полностью, например, до недавнего времени не было никаких данных, как это происходит при 2D зарождении, также неизученной оставалась дефектная структура кристаллов белков ввиду трудностей их исследования.

В докладе проводится анализ механизмов образования дефектов в зависимости от условий и механизма роста кристаллов. Показано, что определяющим для образования дефектов является именно механизм роста, что позволяет проводить его идентификацию по картинам распределения дефектов. Рентгенотопографические исследования кристаллов KDP и лизоцима доказывают общность механизмов дефектообразования в них как в случае спирального роста, так и при двумерном образовании зародышей. Таким образом, неорганические и биоорганические кристаллы могут служить друг для друга модельными объектами в плане изучения механизмов роста и дефектообразования. Наблюдаемые различия, в конечном счете, связаны со свойствами самих кристаллов: структурой, характером химической связи, размером строительных единиц. Обсуждаются особенности выращивания различных кристаллов, в том числе в условиях микрогравитации.

Исследования выполнены при поддержке грантов РФФИ 96-03-33316-а, 00-02-17557-а, 05-02-17301-а, 10-02-01303-а, 11-02-12120-офи-м, 13-02-12163-офи-м, 16-29-11785-офи-м.

НЕЙРОСЕТЕВОЙ ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

Демин В.А.[1,2], Ковальчук М.В.[1,2,3,4]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] МФТИ
[3] МГУ имени М.В. Ломоносова
[4] Санкт-Петербургский государственный университет
e-mail: demin.vyacheslav@mail.ru

О том, как работает орган, обеспечивающий сложные когнитивные функции у высших животных и сознание у человека, – мозг, человечество стало задумываться с самого зарождения философии как метода познания мира. Но только примерно с конца 40-х годов XX века с возникновением и развитием информационных технологий ученые из разных областей: нейрофизиологи, кибернетики, физики – всерьез стали рассматривать задачи моделирования интеллекта. С недавним бурным развитием нанотехнологий появилась возможность перенести исполнение задач подражания отдельным функциям интеллекта на аппаратный уровень со специально спроектированной высокопараллельной архитектурой связей в сети отдельных элементов, среди которых в последнее время все более заметную роль играют наноструктурированные сопротивления с эффектом памяти – мемристоры. Тем не менее, ни программная, ни аппаратная реализация нейросетевых архитектур пока не приблизили человечество к устранению «провала в объяснении» («explanatory gap») диалектической связи материальной и чувственно-мыслительной основ интеллекта. Данное исследование является попыткой анализа имеющихся знаний о «составе» и «структуре» мозга с целью изучения возможности построения модели, описывающей проявление его наблюдаемых «свойств», то есть высших когнитивных функций. Высказанные идеи не претендуют на реализацию сильного (самосознающего) искусственного интеллекта, но, по крайней мере, могут служить предпосылками для создания антропоморфных интеллектуальных технических систем нового поколения.

АРХЕОЛОГИЧЕСКИЕ ДРЕВНОСТИ РОССИИ КАК ОБЪЕКТ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ: НОВЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Макаров Н.А.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт археологии Российской академии наук

Использование современных методов естественных наук и новейших инструментальных средств в археологии существенно раздвигают горизонты гуманитарной науки. Новые технические возможности и преимущества междисциплинарного взаимодействия обеспечивают более высокий уровень достоверности в археологических реконструкциях, способствуют составлению всеобъемлющей и максимально полной картины прошлого, основанной на всесторонней интерпретации материалов археологических раскопок и ландшафтных проектов, дающих, наряду с археологическими, антропологические, палеоклиматические, палеозоологические, технологические и пр. данные.

В настоящее время изучение природной среды, ландшафтов, палеоэкологии, природных условий, в которых протекало становление и развитие древних культур, является неотъемлемой частью научного исследования и формирования панорамы прошлого. Совершенно очевидно, что динамика климатических изменений выступала значимым фактором, воздействующим на развитие древних и средневековых обществ, и должна быть предметом всестороннего анализа. Сегодня изучение взаимодействия древних социумов и палеосреды – одно из самых востребованных направлений в исследовании прошлого, однако остро ощущается необходимость модернизации этой области изысканий, с применением современных подходов и технологий. Ранее недоступная информация о пространстве обитания и образе жизни, физических нагрузках и роде занятий в древности, профессиональных занятиях, заболеваниях может быть актуализирована при помощи методик, сформировавшихся на стыке наук.

Ставшие уже рутинными GIS-технологии и сопровождающее программное обеспечение позволили с иной точностью и достоверностью применительно к археологическим памятникам представить распределение объектов, визуализировать не только центральные поселенческие структуры или погребальные комплексы, но и обеспечивающую их округу, предоставило большие возможности для панорамных и пространственных реконструкций.

Детализация хронологии культур и определение места объектов на временной шкале, уточнение датировок предметов и явлений невозможно без применения самого современного арсенала методов и новейшего оборудования. Обновление инструментальной базы уран-ториевых, радиоуглеродных (AMS), дендрохронологических и др. датировок позволили исключить из списка ранее не подлежавших датированию объектов многие овеществленные проявления материальной и духовной культуры.

Исследование древних и средневековых материалов и технологий невозможно вне естественнонаучных данных, получаемых с помощью современных приборов, использующих различные виды излучений. Рентгеновская и нейтронная томография, изотопный анализ, приборы, использующие инфракрасный и ультрафиолетовый диапазоны, хроматографические методы и пр. - этот арсенал средств позволяет обновить данные об археологических объектах (как органических, так и неорганических) и получить их всесторонние характеристики.

Следует отметить, что только согласованное взаимодействие естественников и гуманитариев, четкая формулировка конкретной задачи исследований, нацеленных на воссоздание значимых исторических явлений, позволят обозначить рациональный формат сотрудничества, расширить поле междисциплинарных исследований и осмысленно задействовать обширные возможности современной приборной базы и методов естественных наук в историческом ракурсе.

УВИДЕТЬ – ЗНАЧИТ ПОНЯТЬ. ОТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ К БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ

Попов В.О.
ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва
НИЦ «Курчатовский институт», Москва
e-mail: vpopov@inbi.ras.ru

Структурная биология является одной из движущих сил современных наук о жизни. Ее бурное развитие в последние десятилетия выразилось во взрывообразном росте числа доступных структур макромолекул (по состоянию на октябрь 2016 г. в Protein Data Bank доступно более 120 тысяч структур, представляющих почти 1400 уникальных топологий) и выяснении деталей организации строения белков и их комплексов с высоким, вплоть до атомного, разрешением. Информация о пространственном строении макромолекул незаменима при решении ряда важнейших практических задач от поиска новых лекарственных препаратов до разработки высокоэффективных специфических биокатализаторов для разнообразных биотехнологических приложений. Будут проанализированы научные и технологические прорывы последних лет, приведшие к бурному прогрессу в области структурной биологии, и представлены основные тенденции, проблемы и задачи этого научного направления. Будут представлены результаты структурных исследований NAD-зависимых дегидрогеназ, металлоферментов, сложных наномашин и ферментов экстремофильных микроорганизмов, полученные в лабораториях автора.

ПРИРОДНЫЕ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Чвалун С.Н.
НИЦ «Курчатовский институт»
ИСПМ РАН
e-mail: Chvalun_SN@nrcki.ru

Обсуждаются современные представления о надмолекулярной организации природных нанокомпозиционных материалов на основе структурных полисахаридов и коллагена [1]. На основании проведенных структурных исследований предложена модель строения хитин-протеинового комплекса кальмара *Berryteuthis magister* [2]. Рассмотрены разработанные методы получения нанокристаллов и нанофибрилл целлюлозы и хитина, а также их структура и свойства. Приведены различные способы получения нанокомпозитов с использованием водорастворимых, воднодиспергируемых и гидрофобных полимерных матриц. Особое внимание уделено способам преодоления несовместимости полимера и частиц полисахаридов. Предложена оригинальная методика эксфолиации β-хитина и синтеза композиционного материала методом полимеризации *in situ.* Метод полимеризационного наполнения позволяет получать композиты с равномерным распределением фибрилл наполнителя. На примере β-хитина в качестве наполнителя полиакриловой кислоты показано, что использование небольших наполнений позволяет кратно увеличить модуль Юнга композита по сравнению с чистой полимерной матрицей при высокой относительной влажности воздуха. Рассмотрены особенности структурной организации межклеточного коллагенового матрикса тканей живых организмов, начиная с молекулярного и заканчивая клеточным уровнями. Показано влияние процедуры децеллюризации на структуру и механические свойства коллаген-содержащего межклеточного матрикса, особенно на его устойчивость к циклическим нагрузкам [3].

[1] Богданова О.И., Чвалун С.Н. Природные и синтетические нанокомпозиты на основе полисахаридов // Высокомолекулярные соединения, А. – 2016. – Т. 58. – № 5. – С. 407–438.

[2] Bogdanova O.I. et al. Structure of β-chitin from Berryteuthis magister and its transformation during whisker preparation and polymerization filling // Carbohydrate Polymers. – 2016. – V. 137. – P. 678–684.

[3] Gubareva E.A. et al. Orthotopic transplantation of a tissue engineered diaphragm in rats // Biomaterials. – 2016. – V. 77. – P. 320–335.

НЕЙРОНАУКА И ГУМАНИТАРНОЕ ЗНАНИЕ

Черниговская Т.В.
Санкт-Петербургский государственный университет
t.chernigovskaya@spbu.ru

Исследование языка, сознания и обеспечивающих их мозговых механизмов занимает важнейшее место в науке XXI века. Мир для нас таков, каким мы способны его воспринять и описать, и от понимания функций мозга зависит наше положение в мире и наша цивилизация. Изучением высших психических функций человека занимается мультидисциплинарная конвергентная область знания - нейронаука. Определить границы собственно антропологического списка когнитивных и языковых компетенций человека непросто. Для формулирования гипотез и интерпретации результатов эмпирических исследований принципиально важно осознать, с одной стороны, общность принципов, которые эволюция использовала для организации сложного поведения, для индивидуального и социального обучения, для кодирования информации, сознания, а с другой, — специфичный для человека тип процедур, отличных не только от модели, выражаемой компьютерной метафорой, но и от возможностей иных биологических видов. Идеи построения интегрального знания о человеке вполне могут определить научное и философское пространство наступившего столетия. В этой области науки Россия традиционно занимает одну из лидирующих позиций в мире, свидетельство тому такие виднейшие ученые как И. М. Сеченов, А. А. Ухтомский, И. П. Павлов, В.В.Вернадский, В. М. Бехтерев, Л. С. Выготский, П. К. Анохин, А. Н. Леонтьев, А. Р. Лурия, Н.П. Бехтерева. Нейронаука требует высокой технологической оснащенности -фМРТ с трактографией, ПЭТ/КТ, магнито- и эхоэнцефалографы, оптические томографы, высокоточные приборы регистрации микро-движений глаз, артикулографы и миниатюрные микрофоны, электро-глоттографы, назометры, измерители давления воздушного потока и т.д. Требуются и хорошая гумантитарная подготовка, иначе ошибки в постановке задачи и интерпретации неизбежны; нужны много-дисциплинарные специалисты, подготовленные в лучших научных центрах.

Секция 1. Современная кристаллография

НЕСОРАЗМЕРНО-МОДУЛИРОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ ПЕРОВСКИТОВ

Абакумов А.М.
Сколковский институт науки и технологий
Химический факультет, Московский государственный университет
e-mail: a.abakumov@skoltech.ru

Семейство перовскитоподобных оксидов отличается большим структурным разнообразием благодаря способности перовскитного каркаса к различным структурным искажениям, таким как кооперативные повороты октаэдров BO_6, ян-теллеровское искажение октаэдров BO_6, (анти)сегнетоэлектрические смещения A и B катионов за счет эффекта Яна-Теллера второго рода, упорядочение анионных и катионных вакансий. Более сложные несоразмерно-модулированные перовскитные структуры возникают при наличии двух типов структурных нестабильностей, конкурирующих друг с другом. Применение комбинации современной просвечивающей электронной микроскопии и порошковой рентгеновской/нейтронной дифракции для исследования таких структур будет проиллюстрировано на примерах соединений $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ и $Li_{3x}Nd_{2/3-x}TiO_3$ (Рис. 1), где смещения A и B катионов, соответственно, накладываются на кооперативные искажения перовскитного октаэдрического каркаса, приводя модуляциям атомных смещений в кислородной и катионной подрешетках [1 – 3].

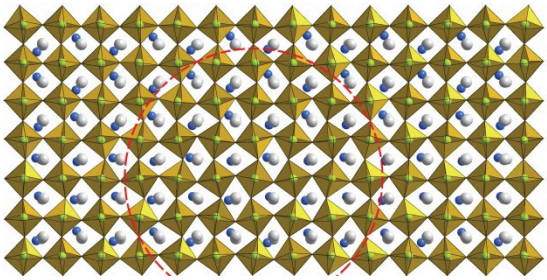


Рис.1. Фрагмент несоразмерно-модулированной структуры перовскита $Li_{0.15}Nd_{0.617}TiO_3$.

Образование модулированных структур в аниондефицитных перовскитах может быть вызвано сегрегацией кислородных вакансий с последующим упорядочением планарных дефектов, где несоразмерность возникает за счет релаксационных атомных смещений на границах перовскитных структурных блоков. Описание таких структур с помощью аппарата многомерной кристаллографии будет продемонстрировано на примерах соединений $(Pb,Bi)_{1-x}Fe_{1-x}O_{3-y}$ и $Pb_{1-x}(Ti_{1-z}Fe_z)_{1+x}O_{3-y}$ с плоскостями кристаллографического сдвига [4, 5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (14-13-00680).

[1] D.A. Rusakov et al, Chem. Mater., 23, 285 (2011).
[2] A.M Abakumov et al, Chem. Mater., 25, 2670 (2013).
[3] R. Erni et al, Nature Mater., 13, 216 (2014).
[4] A.M Abakumov et al, Chem. Mater., 23, 255 (2011).
[5] D. Batuk et al., Angew. Chem. 54,14787 (2015).

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ КИСЛОРОДПРОВОДЯЩИХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МОЛИБДАТОВ

Алексеева О.А.[1], Сорокина Н.И.[1], Антипин А.М.[1,2], Верин И.А.[1], Харитонова Е.П.[3], Орлова Е.И.[3], Воронкова В.И.[3]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[3] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*
e-mail: olalex@crys.ras.ru

Кристаллические материалы, обладающие кислородной проводимостью, находят применение в кислородных сенсорах, газоразделительных мембранах, в качестве твердых электролитов. Кислородная проводимость обнаружена в оксидах со структурой флюорита, перовскита, браунмиллерита, апатита и в редкоземельных молибдатах.

Цель данного исследования – синтез поли- и монокристаллов, исследование полиморфизма, строения и свойств редкоземельных молибдатов трех семейств: $Ln_2Mo_2O_9$, $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ и Ln_2MoO_6.

В результате комплексного исследования строения серии монокристаллов семейства $Ln_2Mo_2O_9$, где Ln=La, Pr в интервале температур от 33K до комнатной выявлены: смещение атомов La,Pr, Mo и O1 относительно тройной оси, на которой находятся эти атомы в высокотемпературной β-фазе, недозаселенность позиций атомов кислорода O2 и O3, существование их в структуре в статическом беспорядке. Установлены причины стабилизации высокотемпературной кубической β-фазы соединения $La_2Mo_2O_9$ при легировании ее примесями Bi, Sb, V. Для образцов семейств $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ и Ln_2MoO_6, где Ln=Pr, Nd (чистых и легированных V, Pb, Ca, W) впервые экспериментально доказано частичное взаимозамещение катионов Nd,Pr и Mo. В структуре монокристаллов семейства $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ найден избыточный кислород O3, который занимает октаэдрические позиции в полостях структуры. Для всех исследованных образцов трех вышеуказанных семейств установлен механизм кислородной проводимости, определены пути миграции ионов кислорода и проанализирована динамика изменения их строения и проводящих свойств с изменением состава.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-02-00531.

ЭФФЕКТЫ РЕЗОНАНСНОЙ МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТИ В СВЕРХНИЗКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: mkoldaeva@ns.crys.ras.ru

Обсуждаются резонансные релаксационные перемещения дислокаций в кристаллах NaCl при их экспозиции в схеме электронного парамагнитного резонанса в скрещенных сверхнизких магнитных полях: постоянном и переменном. В качестве постоянного поля использовалось магнитное поле Земли $B_{\text{Earth}} \approx 50$ мкТл, а также другие поля в интервале 26–261 мкТл. В гармоническом магнитном поле $\widetilde{B}$ радиочастотного диапазона (10 кГц – 7 МГц) движение дислокаций имеет резонансный характер с g-фактором близким к 2. Обнаружены новые сильно анизотропные свойства эффекта, характерные только для сверхнизких магнитных полей. Измерены и обсуждаются частотные спектры, образованные множественными пиками пробегов при низких частотах накачки, а также квартетом эквидистантных пиков при более высоких частотах. Спектр пиков пробегов, начиная с 10 кГц, возникает из-за разных структурных позиций примеси в ядре дислокации. Эффект резонансного перемещения дислокаций также наблюдался при импульсном поле накачки резонансной длительности ~0.5 мкс. Изменение дефектной структуры в сверхнизких магнитных полях сохраняется в ряде кристаллов и спустя длительное время после магнитной обработки. В частности, обнаружены магнитостимулированные изменения микротвердости кристаллов ZnO, TGS и гидрофталата калия после их экспозиции в той же схеме ЭПР в магнитном поле Земли при $g \approx 2$.

Работа частично поддержана грантом Президиума РАН (Программа № 1).

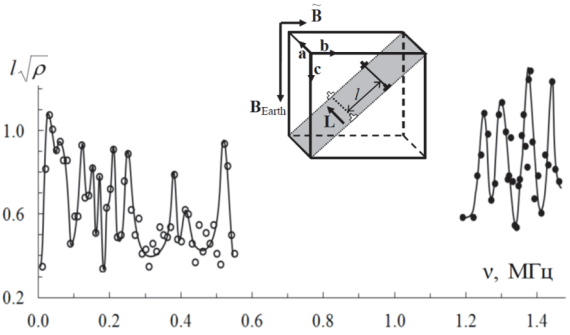


Рис. 1. Частотные спектры пробегов дислокаций в кристалле NaCl в схеме типа ЭПР в магнитном поле Земли. На вставке показаны схематическое изображение плоскости скольжения дислокаций $\boldsymbol{L}$*, пробегов l и взаимная ориентация полей и образца в эксперименте (*$\widetilde{\boldsymbol{B}} \perp \boldsymbol{B}_{Earth}$*,* $\widetilde{B}$ *= 2.5 мкТл, экспозиция 5 мин).*

ПЕРЕДОВЫЕ СУПЕРИОННЫЕ ПРОВОДНИКИ: СТРУКТУРА, СВОЙСТВА

Андреева А.В., Деспотули А.Л.
Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия
e-mail: andreeva@ipmt-hpm.ac.ru

Среди твердотельных ионных проводников (ИП) выделен класс «передовые суперионные проводники» (ПСИП) [1,2]. Кристаллическая структура ПСИП (α- AgI, α-$RbAg_4I_5$ и др.) близка к оптимальной для быстрого ионного транспорта (БИТ), что определяет рекордно-высокий уровень ион-транспортных свойств ($\sigma_i \approx 0.3$ Ом$^{-1}$см$^{-1}$ при 300 К, $E_a \approx 4\ k_BT_{300} \approx 0.1$ эВ). Для ПСИП выявлены специальные дескрипторы, основанные на группе симметрии жесткой подрешетки, топологии и локальной симметрии взаимосвязанных межузельных мест, по которым по прыжковому механизму перемещаются подвижные ионы. Доказана важная роль связанных гранями тетраэдрических кристаллографических мест для БИТ. Показано, что границы зерен (ГЗ) влияют противоположно на значения σ_i и E_a в ПСИП и в других ИП. Для микро- наносистем различных типов ИП предложен рациональный 3-D дизайн на разных уровнях масштаба структуры. (атомном - элементарная ячейка; мезо--доменная структура, микро - поликристаллическая структура). Нами предложено новое направление – «наноионика ПСИП» [1,2]. Анализируются взаимосвязанные топологические, кристаллохимические и ион-транспортные свойства ГЗ и гетеропереходов (ГП) – ключевых элементов наноионных приборов. Для объяснения ряда экспериментальных данных применяли теорию БИТ на наномасштабе [3]. Представлены структурные модели специальных ГЗ в ПСИП с туннелями БИТ, а также атомные модели ГП включающих углеродные наноструктуры с высокой квантовой емкостью [4].

[1] A.V. Andreeva, A.L. Despotuli // Ionics. 2005. V.11. P.152- 160

[2] A.L. Despotuli, A.V. Andreeva, B. Rambabu, // Ionics. 2005. V.11. P.306-314

[3] A.L. Despotuli, A.V. Andreeva // 2013 http://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1311/1311.3480.pdf

[4] A.L. Despotuli, A.V. Andreeva //Nanoscience and Nanotechnoogy Letters. 2011.V.3.P.119-124

НОВАЯ КЛАСТЕРНАЯ КОНЦЕПЦИЯ КРИСТАЛЛОБРАЗОВАНИЯ

Асхабов А.М.
ИГ Коми НЦ УрО РАН
e-mail: xmin@geo.komisc.ru

В 20-м веке в теории роста кристаллов параллельно развивались две конкурентные концепции. Согласно первой, связанной с именами Косселя и Странского, рост кристалла происходит путем присоединения отдельных атомов или ионов (атомарный рост). Вторая концепция предполагает рост кристаллов путем присоединения готовых кристаллических блоков (микроблочный рост). В разное время были выдвинуты предположения об участии в росте кристаллов промежуточных образований (молекулярных комплексов, кластеров и т.д.). Однако на этой основе не удавалось разработать альтернативную концепцию из-за возникавших противоречий с классической теорией зарождения и роста кристаллов и невозможности доказательства стабильного существования предзародышевых кластеров. В последние годы ситуация резко изменилась [1]. Уже признано, что образование кристаллических зародышей происходит посредством таких кластеров (так называемый двухступенчатый [2] и кватаронный [3] механизмы зарождения). Вместе с тем, предложенная на этой же основе гипотеза о кластерном (кватаронном) росте кристаллов еще не получила признания.

В докладе показано, что кватароны благодаря своим уникальным свойствам являются идеальными ростовыми единицами [4]. Их присоединение к кристаллу облегчается тем, что они топологически близки к структурным модулям кристалла. Полная адаптация структуры кватаронов к кристаллической структуре происходит на растущей грани. Кроме трансформации кватаронов в двумерные зародыши (2D-механизм роста) возможны также следующие варианты роста кристаллов с участием кватаронов; распад кватаронов на растущей грани на отдельные атомы (атомарный рост по Косселю); кристаллизация кватаронов в среде и их присоединение к растущей грани (3D-рост). Предельным случаем 3D-роста выступает микроблочный рост или рост путем ориентированной агрегации кристаллических частиц.

[1] Gebauer D. et al., 2014, 43, p. 2348-2371.

[2] Vekilov P. Nanoscale, 2010, 2, p. 2346-2357.

[3] Асхабов А.М. //ЗВМО, 2004, 133, с.108-123.

4] Askhabov A.M. // Vestnik IG Komi SC UB RAS, 2015, 4, p. 3-7

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА

Белов А.Ю.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: belov@crys.ras.ru

Среди неупорядоченных форм углерода особое место занимает алмазоподобный (или тетраэдрический, *ta*-C) углерод, который является метастабильной формой аморфного углерода, обладающей свойствами алмаза из-за высокого (~ 80%) содержания атомов C с sp^3-гибридизацией. Фактически, *ta*-C можно рассматривать как неупорядоченный аналог алмаза. Интерес к этому материалу обусловлен уникальным сочетанием его механических и оптических свойств, благодаря которому *ta*-C оказался чрезвычайно перспективным для применения в микроэлектромеханических системах. Другим важнейшим свойством алмазоподобного углерода является его высокая химическая инертность, открывающая возможность получения идеальных биосовместимых покрытий для различных приложений в медицинской технике.

Структура высокопрочных тонких плёнок *ta*-C, получаемых методами ионно-лучевого осаждения, характеризуется не только процентным содержанием sp^3 атомов в алмазоподобной тетраэдрической фазе *ta*-C, но и размером и топологией вкючений графитоподобной фазы, образуемых атомами C с sp^2-гибридизацией. Если высокое содержание тетраэдрических атомов является причиной высокой прочности пленок *ta*-C (сопоставимой с прочностью алмаза), то топология кластеров графитоподобной фазы определяет его электронную структуру и оптические свойства.

В данной работе методами компьютерного моделирования исследуется термическая стабильность алмазоподобного углерода в зависимости от содержания атомов с sp^2-гибридизацией. Методом молекулярной динамики с применением многочастичного потенциала межатомного взаимодействия изучены особенности структурных превращений в пленках аморфного углерода при низкотемпературном отжиге. Также исследовано влияние структурных превращений на механические свойства пленок: уровень внутренних напряжений и модуль упругости. Получена температурная зависимость содержания атомов углерода с sp^3-гибридизацией в алмазоподобной фазе. В случае моделей *ta*-C с плотностью, превышающей ~3.0 г/см^3, содержание sp^3-гибридизованных атомов практически не зависит от температуры отжига вплоть до температуры перехода в графитоподобную фазу. Также показано, что при значении плотности аморфного углерода ~2.9 г/см^3, отвечающем ~70%-ному содержанию атомов с тетраэдрическим окружением, однородная структура пленок становится неустойчивой по отношению к образованию нанокластеров атомами с sp^2-гибридизацией. Моделируемый отжиг при температурах ~1000 K приводит к образованию неоднородных структур (нанокомпозитов), состоящих из высокотетраэдрической матрицы и включений графитоподобной фазы (см. Рис. 1). Исследована связь процесса кластерообразования с релаксацией внутренних напряжений в пленках. Показано, что образование нанокластеров происходит после полной релаксации напряжений.

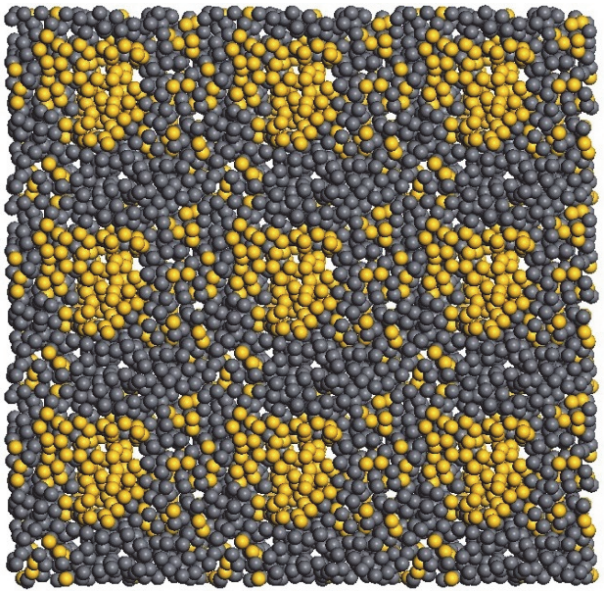


Рис.1. Модель атомной структуры аморфного нанокомпозита с алмазоподобной матрицей и включениями графитоподобной фазы. Структура получена в результате молекулярно-динамического моделирования процесса термического отжига однородной ta-C пленки.

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ ЭЛЕКТРОНА В ГРАФЕНЕ

Белослудцев А.В., Савинский С.С.
ФГБОУВО «Удмуртский государственный университет»
e-mail: savinsky@uni.udm.ru

Рассматривается оператор Гамильтона π-электронов графена в длинноволновом приближении в k–пространстве вблизи одной из точек Дирака (см. [1]), который может быть записан в следующем виде

$$H = V \times (\sigma_x \times \hat{p}_x + \sigma_y \times \hat{p}_y) + \Delta \times \sigma_z, \qquad (1)$$

где $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_y$ - операторы импульса вдоль осей Ox и Oy, $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ - матрицы Паули, Δ - параметр, определяющий в энергетическом спектре электрона ширину запрещенной щели равную 2Δ, V – скорость электрона. Для идеального плоского графена параметр Δ равен нулю, мы рассматриваем ситуацию с Δ не равным нулю, что может быть инициировано внешним воздействием на графен. Спектр оператора (1) содержит две зоны: валентную и проводящую разделенные щелью величиной 2Δ.

В матричных обозначениях оператор Гамильтона электрона графена (1) в поле кулоновского потенциала, создаваемого ионизированным атомом примеси, примет вид

$$\hat{H} = V\begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} + \Delta\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{Ze^2}{r}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

в (2) $-\frac{Ze^2}{r}$ - энергия кулоновского взаимодействия электрона с примесным атомом. Заметим: под параметром Z в энергии кулоновского взаимодействия будем понимать эффективный экранированный заряд иона, включающий в себя диэлектрическую проницаемость графена, также будем анализировать ситуацию, связанную с выбором знака параметра Z для положительно либо отрицательно заряженного иона.

Задача о спектре и собственных функциях оператора (2) решалась в полярных координатах, собственные функции (псевдоспиноры) были выбраны в виде

$$\psi(r,\varphi) = \begin{pmatrix} exp(i(m-\frac{1}{2})\varphi) \times G(r) \\ exp(i(m+\frac{1}{2})\varphi) \times F(r) \end{pmatrix},$$

где $m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \ldots$, функции $G(r), F(r)$ находятся из решения стационарного уравнения Шредингера. Точное решение задачи о спектре (2) для связанных состояний электрона в кулоновском поле примесного атома приводит к следующей формуле

$$E = \pm\frac{\Delta}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\beta^2}{\left(n + \sqrt{m^2 - Z^2\beta^2}\right)^2}}}, \quad \beta = \frac{e^2}{\hbar V}, \qquad (3)$$

где число n принимает целые значения и играет роль «радиального квантового числа». Заметим, формула (3) имеет смысл для значений параметра $|Z\beta| \le \frac{1}{2}$, для графена параметр β играет роль «постоянной тонкой структуры», которая проявляется при решении задачи о водородоподобном атоме с использованием дираковского оператора Гамильтона [2]. Знак в формуле (3) определяется знаком эффективного экранированного заряда иона Z.

[1] Katsnelson M. I. Graphcne: carbon in two dimensions. (New York. Published in ihe United States of America by Cambridge University Press., 2012), p. 351.

[2] Ициксон К., Зюбер Ж.-Б. Квантовая теория поля, т.1, М.: Мир,1984, р.448.

РЕЗОНАНСНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ПУЧКОВ В АККУСТИЧЕСКИХ КРИСТАЛАХ ВБЛИЗИ КОНВЕРСИОННОГО ОТРАЖЕНИЯ

Бессонов Д.А., Альшиц В.И., Любимов В.Н.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: dabessonov@gmail.ru

Рассмотрено резонансноое концентрирование энергии в акустических пучках с помощью их незеркального отражения от поверхности кристалла в специальной геометрии, когда энергия из падающего пучка волны накачки попадает в приповерхностный узкий отраженный пучок. Явление резонанса основано на уменьшении ширины отраженного пучка относительно ширины падающего. Выбор ориентации границы, плоскости отражения и угла падения обусловлен требованием близости отраженной волны к собственной объемной моде с потоком энергии вдоль границы. При отражении падающего пучка ширины D_i один из двух отраженных пучков распространяется под малым углом β_r к поверхности, и потому сильно сужается до ширины d_r. Коэффициент K^{ex} усиления пучка, очевидно, оценивается величиной порядка $\eta D_i/d_r = \eta \sin\alpha_i/\sin\beta_r >> 1$, где η – доля энергии, попадающей из падающего в сжатый пучок. Выбирая оптимальную геометрию распространения, можно добиться почти полного подавления паразитного пучка, так чтобы КПД эффекта η был близок к 100%.

Конечно, по мере сужения возбуждаемого пучка растет и его дифракционная расходимость. Тем не менее, при достаточно высоких частотах можно повысить интенсивность пучка в 5-10 раз, сохранив его расходимость на приемлемом уровне. Речь идет о явлении, существующем только в кристаллах. В изотропной среде такое же сужение пучка при отражении его интенсивность не повышает: в этом случае доля η энергии в сужающемся пучке стремится к нулю по мере уменьшения его ширины.

Оптимизация параметров резонансного отражения велась в самом общем случае при варьировании по трем углам, отвечающим за выбор геометрии, и углу падения. Получены как приближенное аналитическое решение задачи, так и точные численные результаты для классических акустических кристаллов различных сингоний. Рассмотрены кремний, парателлурит, фторид лития, титанат бария, сегнетова соль, графит и т.д.

ТРАНСФОРМАЦИЯ СТРУКТУРЫ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА $LiNi_{0.8}Co_{0.15}Al_{0.05}O_2$ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ЦИКЛИРОВАНИЯ

Бобриков И.А., Балагуров А.М., Самойлова Н.Ю.
Объединенный институт ядерных исследований
e-mail: bobrikov@nf.jinr.ru

С помощью нейтронной дифракции высокой интенсивности проведено исследование поведения кристаллической структуры катодного материала $LiNi_{0.8}Co_{0.15}Al_{0.05}O_2$ в процессе заряда-разряда (*operando*). В качестве электрохимической ячейки использовался коммерческий аккумулятор типоразмера 18650. Основные эксперименты выполнены на дифрактометре реального времени (РТД), расположенного на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2. Получено, что в процессе электрохимического циклирования происходит анизотропное и нелинейное изменение параметров элементарной ячейки исследованного катодного материала. При заряде ячейка сначала расширяется вдоль гексагональной c-оси и несколько сжимается в базисной плоскости (a и b оси). Ближе к концу заряда происходит резкое сжатие вдоль c-оси и некоторое расширение по a и b осям. В докладе приведены объяснения наблюдаемого поведения кристаллической структуры $LiNi_{0.8}Co_{0.15}Al_{0.05}O_2$, показаны результаты моделирования структуры с использованием теории функционала плотности для данного катода при различных уровнях содержания лития.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-12-00896).

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ДИНАМИКИ СВЕРХСТРУКТУРЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ФАЗЫ СЕГНЕТОЭЛАСТИКА Hg_2Cl_2 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭФФЕКТА АНОМАЛЬНОГО ПРОПУСКАНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Бойко М.Е., Шарков М.Д., Бойко А.М. Конников С.Г.
Физико-Технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН
e-mail:m.e.boiko@mail.ioffe.ru

Кристаллы каломели Hg_2Cl_2 обладают уникальным комплексом физических свойств, таких как рекордное двулучепреломление, низкая скорость звука. При T_c= 185 К Hg_2Cl_2 они испытывают структурный фазовый переход типа смещения $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{17}$, и сопровождающийся удвоением элементарной ячейки. В низкотемпературной ромбической фазе эти кристаллы являются чистыми несобственными ферроэластиками. Рентгенограммы показывают, что этот переход носит характер появления сверхструктуры. При температуре ниже фазового перехода получается новая ромбическая решетка с осями на прежних направлениях $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$. Кристаллы дают две идентичные системы рефлексов, накладывающиеся одна на другую и повернутые относительно друг друга в обратном пространстве вокруг оси *z* на 90°. Это следствие доменности структуры кристаллов,

В настоящей работе была поставлена задача определения размеров этих доменов. Аномальное прохождение по Борману дало картину появления сверхструктурных образований размером до 1000А в однородном до критической температуры кристалле. При температурах ниже фазового перехода произошел скачок интенсивности брэгговских пиков прошедшего излучения. Сканирование по поверхности кристалла позволило найти участки, где рентгеновский пучок рассеивался на доменах одного направления и захватывал участок с двумя, взаимно перпендикулярными доменами.

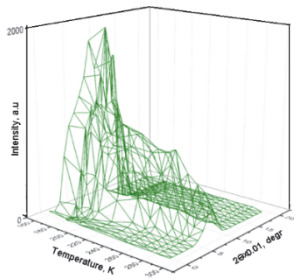


Рис.1. Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей на сверхрешетках из сегнетоэластических доменов в режиме аномального прохождения по Борману вдоль оси (001).

Построена динамика размеров доменов в процессе охлаждения.

[1] Boiko M.E. //Inst.Phys.Conf.Ser. No 155 Chapter 12, 1997 IOP Publishing LTd, pp 989-991.

[2] Boiko M.E., Markov Yu.F., and others //Ferroelectrics, 1992, 130, P.263-283

ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

Болдырева Е.В.
ИХТТМ СО РАН
e-mail: eboldyreva@yahoo.com

Исследования различных объектов в условиях высоких давлений актуальны для нескольких областей знания – физики, химии, наук о материалах, экспериментальной минералогии, геохимии, физической фармации, биологии. В условиях лаборатории возможно создавать высокие давления до миллиона атмосфер и при этом исследовать структуру и свойства вещества *in situ* комплексом методов, в том числе, при помощи дифракции рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов. При этом наблюдается развитие исследований либо в направлениии достижения все более высоких давлений (при этом, нередко, ценой уменьшения объема исследуемого образца и его сложности), либо в направлении всё большей сложности объекта, вплоть до биополимеров и их комплексов (при этом, ценой ограничений в величине достигаемого давления). Органические молекулярные кристаллы занимают в этой иерархии центральное положение - системы достаточной сложности и низкой, вплоть до триклинной, симметрии, с большим числом симметрически независимых молекул могут быть детально изучены методами монокристальной и порошковой рентгеновской дифракции, а также колебательной и оптической спектроскопии вплоть до давлений в сотни тысяч атмосфер. В докладе будет дан обзор современного состояния исследований в данной области, касающийся как полученных результатов, так и методических приемов, использованных для их достижения.

Автор благодарит РНФ (грант 14-13-00834) за поддержку исследований.

МОДУЛИРОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ НЬЕРЕРЕИТА $(Na,K)_2Ca(CO_3)_2$ И ЕГО СИНТЕТИЧЕСКОГО АНАЛОГА $Na_2Ca(CO_3)_2$

Болотина Н.Б.[1], Гаврюшкин П.Н.[2,3], Корсаков А.В.[2,3], Ращенко С.В.[2,3], Сереткин Ю.В.[2,3], Головин А.В.[2,3], Bertrand N. Moine[4], Зайцев А.Н.[5,6]

[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН*

[3]*Новосибирский государственный университет*

[4] *Université J. Monnet, Saint-Etienne FRANCE*

[5] *Санкт-Петербургский государственный университет*

[6] *Natural History Museum, London, UK*

bolotina@ns.crys.ras.ru

Сверхструктура кристалла $Na_2Ca(CO_3)_2$, полученного методом гидротермального синтеза, установленная традиционными методами РСА в ромбической группе $P2_1ca$ [1], модулирует с периодом A=10.0713(5) Å, равным периоду сверхструктуры. В (3+1)D формализме для модулированных кристаллов, та же структура относится по типу к соразмерно модулированным и получает описание в (3+1)D решетке с периодом $\mathbf{a}-\mathbf{q}\cdot\mathbf{e}_4$, $\mathbf{a}=\mathbf{A}/2$ и волновым вектором $\mathbf{q}=0.5\mathbf{a}^*$. Суперпространственный подход – единственно возможный для ньеререита, минерала вулканического происхождения $(Na_{0.82}K_{0.18})_2Ca(CO_3)_2$, структура которого модулирует несоразмерно периоду базисной решетки с волновым вектором $\mathbf{q}(\alpha 00)=0.383(1)\mathbf{a}^*$. Структура ньеререита установлена в группе (3+1)D симметрии *C2cm*(α00)*s*0*s*. Сложная позиционная модуляция CO_3 групп в структуре ньеререита представлена ступенчатыми функциями-кренелями в сочетании с гармоническими функциями на интервале существования кренелей. Тем же способом представлены негладкие модуляции Ca, происходящие в фазе со смещениями CO_3 групп. Несоразмерная модуляция ньеререита обусловлена комплементарной модуляцией заселенности смешанных (Na,K) позиций. Позиционные смещения этих атомов представлены гармоническими функциями.

Финансовая поддержка: гранты РФФИ №14-05-31051 и 13- 0312158; гранты Минобрнауки № 14.B25.31.0032 и МК-3766.2015.15; АВК и АВГ поддержаны грантом РНФ №15-17-30012.

[1] Gavryushkin, P. N. et al. Cryst. Growth Des. (2016). 16(4), 1893–1902.

МЕТОДИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ АНАЛИЗА КОСМИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Верезуб Н.А.[1], Волошин А.Э.[2], Простомолотов А.И.[1]

[1]*ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН*

[2]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

e-mail: prosto@ipmnet.ru

Применение методов рентгеновской топографии позволило построить двумерную карту распределения примеси в кристалле GaSbTe, выращенном в условиях микрогравитации [1]. С помощью этой карты были выявлены основные особенности сформировавшейся структуры кристалла и возникшей в нем примесной неоднородности. Установленные количественные данные о распределении примеси в опытном образце стали экспериментальной основой для применения ряда теоретических моделей различного уровня сложности (аналитических и полуаналитических [2], а также численных – гидродинамической [3] и сопряженной [4], показанной на Рис. 1). Такой комплексный методический подход позволил провести всесторонний анализ влияния как контролируемых, так и неконтролируемых параметров процесса кристаллизации (скорости роста кристалла V_S, конвективного движения расплава при различной ориентации и уровне микрогравитации μg, флуктуаций тепловых и механических параметров) на возникновение в кристалле примесной неоднородности.

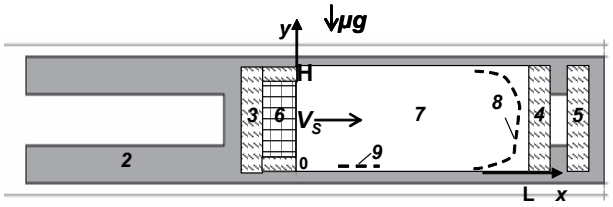


Рис.1. Схема сопряженной модели кристаллизации GaSb:Te методом Бриджмена: 1 – нагреватель; 2 – кварцевая ампула; 3÷5 – графитовые вставки; 6 – кристаллическая затравка; 7 – расплав GaSb:Te; 8 – свободная граница расплава в начале кристаллизации; 9 – участок свободной поверхности, возникающий в процессе кристаллизации. Стрелкой показано направление движения фронта кристаллизации со скоростью V_S.

[1] Voloshin A.E., Nishinaga T., Ge P., Huo C. // J. Cryst. Growth, 2002, vol. 234, p. 12–24.

[2] Prostomolotov A.I., Verezub N.A., Voloshin A.E. // J. of Crystal Growth, 2014, vol. 401, p. 111–115.

[3] Voloshin A.E., Prostomolotov A.I., Verezub N.A. // J. of Crystal Growth, 2016, vol. 453, p. 188–197.

[4] Простомолотов А.И., Верезуб Н.А., Волошин А.Э. // Изв. ВУЗов. МЭТ, 2015, т. 18, № 2, с. 118–126.

ТРАНСФОРМАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ АЛМАЗА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПОСТ ГЕНЕТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Винс В.Г.
ООО «ВЕЛМАН»
e-mail: vgvins@gmail.com

Исследована пост генетическая трансформации примесных и собственных дефектов в природных и синтетических (HPHT, CVD) алмазах. В качестве воздействий на дефектную структуру монокристаллического алмаза применялись:

а) высокотемпературный (T ≥1800°C) отжиг в поле устойчивости алмаза (HPHT отжиг);

б) высокотемпературный (T ≥1500°C) отжиг в поле устойчивости графита (APHT и LPHT отжиги);

в) облучение разными дозами 3 МэВ-ных электронов в комбинации с последующим отжигом (800 °C ≤ T≤1400 °C; 2 часа ≤t ≤ 24 чачса), или без него;

д) облучение разными флюенсами «надтепловых» нейтронов в комбинации с последующим отжигом, или без него;

г) комплексному воздействию, состоящему из различных комбинаций а) - д) – воздействий, что обеспечивает практически полную возможность управления дефектами и примесями в алмазе и получение материала с наперед заданным набором дефектов.

Результаты исследований не только открывают широкие возможности для направленного изменения свойств алмазов, но и являются основой для создания надежных методов идентификации природных, природных облагороженных и синтетических алмазов.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИСТОРИИ РОСТА КРИСТАЛЛА GaSb:Te В НЕВЕСОМОСТИ ПО ДАННЫМ О РАСПРЕДЕЛЕНИИ ПРИМЕСИ

Волошин А.Э.[1], Простомолотов А.И.[2], Верезуб Н.А.[2], Nishinaga T.[3]
[1] Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова
[2] Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
[3] Tokyo University, Japan
voloshin@ns.crys.ras.ru

Неоднородное распределение примеси в кристалле обусловлено условиями его выращивания, поэтому анализ примесной неоднородности позволяет восстановить многие параметры роста кристалла. Такой анализ проводится на примере кристалла GaSb:Te, полученного в результате весьма успешного космического эксперимента, проводившегося, однако, при полном отсутствии контроля параметров роста. Результаты предварительного исследования образца методом количественной рентгеновской топографии сообщались нами ранее [1]. Полученная карта распределения Te в образце позволяет восстановить скорости роста различных зон кристалла и конвективного потока и их изменения во времени. Для расчетов используется доработанная модель Бартона-Прима-Слихтера. Рассчитаны величины осевого и радиального температурного градиентов и скорости охлаждения. Анализируется возможный механизм образования полос неоднородности. Показано, что даже незначительные колебания температуры (~0,1 °K) способны привести к образованию заметной неоднородности распределения примеси.

На основе полученных оценок анализируются оптимальные условия выращивания кристаллов полупроводников в условиях микрогравитации.

[1] A.E. Voloshin, T. Nishinaga, P. Ge, C. Huo. J. Cryst. Growth, 2002, v.234, №1, p.12–24.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ.

Галанин М.П., Гусев А.О., Мажорова О.С., Прошунин Н.Н., Щерица О.В.
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
e-mail:shchery@mail.ru

Предложено две математических модели процесса кристаллизации многокомпонентного раствора. Исследуемый класс задач отличается от классической задачи Стефана тем, что температура фазового перехода зависит от состава твердой и жидкой фазы.

Рассмотрена самосогласованная модель квазиравновесного процесса кристаллизации многокомпонентного раствора в тонкой цилиндрической ампуле. Модель процесса учитывает диффузионный тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации, выделение теплоты в результате фазового перехода, а также теплообмен с окружающей средой. Состояние системы описывается функциями средней в сечении температуры и концентрации, для которых рассматриваемая осесимметричная задача может быть сведена к одномерной задаче о фазовом переходе. Учет движения фронта кристаллизации осуществляется с помощью замены переменных типа Ландау, в результате которой граница раздела фаз остается неподвижной на протяжения всего процесса [1, 2]. Использование неявной разностной схемы и совместное решение уравнений с помощью метода Ньютона в предложенном алгоритме гарантируют получение надежных результатов для широкого диапазона параметров, в частности, в случае моделирования режимов смены растворения ростом и наоборот.

Выполнено моделирование тепловых режимов в установке выращивания монокристаллов ОТФ – методом [3] (осевого теплового потока вблизи фронта кристаллизации). Цель данной работы - оптимизация метода в его конкретных реализациях.

[1] Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В. // Дифференциальные уравнения. 2004. Т. 40, № 7. С. 1051-1060.

[2] Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В. // Дифференциальные уравнения. 2013. Т. 49, № 7.С. 897-905.

[3] Гоник М.А. // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2015;(2):95-102.

К МЕТОДИКЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АНИЗОТРОПИИ УДЕЛЬНОЙ МЕЖФАЗНОЙ ЭНЕРГИИ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО МИГРАЦИИ ЖИДКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В КРИСТАЛЛЕ В СТАЦИОНАРНЫХ ТЕПЛОВЫХ УСЛОВИЯХ

Гармашов С.И., Сурнин В.И., Приходько Ю.В.
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»
e-mail: garmashov@sfedu.ru

В докладе рассматривается вопрос о методике обработки экспериментальных данных по миграции жидких цилиндрических включений в кристалле под действием градиента температуры в предположении, что тепловые условия эксперимента являются стационарными. Как показано в [1, 2], при движении жидкого цилиндрического включения в неоднородно нагретом кристалле форма его поперечного сечения, в общем случае, отличается от равновесной формы, поскольку для протекания процессов кристаллизации (растворения) на атомно-гладких участках межфазной границы требуются конечные величины пересыщений (недосыщений). Кроме того, форма сечения мигрирующего цилиндрического включения зависит также и от анизотропии удельной межфазной поверхностной энергии.

Для того чтобы извлечь информацию об анизотропии удельной межфазной энергии из экспериментальных данных о форме сечения включения необходима адекватная математическая модель. В настоящей работе предложена модель формы сечения включения, учитывающая как межфазную кинетику, так и анизотропию удельной межфазной энергии несингулярных участков границы включения. Разработанная модель положена в основу компьютерной программы, с помощью которой можно, варьируя модельные параметры, приблизить расчетную форму сечения включения к экспериментально полученной. В докладе приводятся и обсуждаются результаты обработки форм сечений включений состава Si-Al, мигрировавших в кристалле Si, анализируются зависимости скорости и формы сечения цилиндрического включения от разных параметров процесса, рассчитанные в соответствии с предложенной моделью.

[1] Garmashov S.I., Gershanov V.Yu. // J. Cryst. Growth, 2009, vol. 311, N 2, p 413-419.

[2] Гершанов В.Ю., Гармашов С.И. // Журн. техн. физ., 2015, том 85, № 1, с 61-65.

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Дегтярева В.Ф.
Институт Физики Твердого Тела РАН, г. Черноголовка, Московская область, Россия
degtyar@issp.ac.ru

Элементы при высоком давлении проявляют многообразные структурные превращения и изменение физических свойств [1-3]. Элементы в правой части Периодической Таблицы с неплотными структурами ковалентного типа испытывают под давлением превращения с повышением компактности упаковки атомов и усилением металлических свойств. Предельной структурой для элементов IV – VII групп при сжатии являются типичные компактные структуры металлов (ОЦК, ГПУ, ГЦК). Обратная тенденция наблюдается для элементов I - II групп в левой части Периодической Таблицы, которые испытывают при сжатии многократные превращения от плотноупакованных структур (ОЦК, ГЦК) в некомпактные, низкосимметричные структуры.

Непредсказуемым результатом явилось обнаружение несоизмеримых структур в однокомпонентной системе – в элементе. Структуры host-guest в Ba, Sr, Bi, Sb и As имеют два типа подрешетки с разными периодами вдоль оси c, отношение которых иррационально. Подобные структуры с другой упаковкой атомов host найдены под давлением для щелочных металлов (Na, K, Rb). Особый тип апериодичности установлен для модулированных структур в сжатых элементах V – VII групп (P, Te, Se, S, I).

Обоснование устойчивости сложных структур в сжатых элементах дается в модели взаимодействия сферы Ферми и зоны Бриллюэна [3,4]. Сжатие при повышении давления приводит к изменению баланса энергетических вкладов – электростатического, предпочитающего высокосимметричные, плотноупакованные структуры, и зонного (электронного), для которого важно образование плоскостей Бриллюэна вблизи поверхности (сферы) Ферми. Усиление электронного вклада при сжатии способствует образованию в элементах под давлением сложных низкосимметричных структур, в том числе и несоразмерных. Появление дополнительных рефлексов для несоразмерных структур соответствует образованию новых плоскостей вблизи уровня Ферми с энергетической щелью, что стабилизирует такие структуры. Для элементов групп I – II при сильном сжатии необходимо допустить перекрытие электронов остова и валентной зоны – увеличение числа валентных электронов.

[1] McMahon M.I., Nelmes R.J // Chem. Soc. Rev., 2006, 35, 943–963.

[2] Degtyareva O. // High Press. Res., 2010, 30, 343–371.

[3] В.Ф. Дегтярева В.Ф. // УФН, 2006, 174, 383-402.

[4] Degtyareva V.F., Smirnova I.S. // Z. Kristallogr., 2007, 222, 718-721.

ТЕХНОЛОГИЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ТВЕРДОФАЗНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Дзябченко А.В.
Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова
e-mail: adz@cc.nifhi.ac.ru

В исследованиях и разработках новых молекулярных материалов, а также биологических макромолекул, опережающее развитие получили методы численного моделирования структуры и динамики молекулярных систем. Кристалл является первой инстанцией на пути от молекулы к объемному веществу, поэтому соответствие предсказанной кристаллической структуры эксперименту является наилучшим способом оценки корректности теоретических моделей межмолекулярного взаимодействия (ММВ), лежащих в основе всякого расчета как твердой (упорядоченной или аморфной), так и жидкой фазы. Наиболее критичными аспектами расчета ММВ являются: влияние кристаллического окружения на конформацию молекул, электростатическое взаимодействие молекул и ограниченная переносимость эмпирических потенциалов вандерваальсовых взаимодействий. Предложенное решение состоит (а) в применении моделей сложных молекул в виде систем жестких молекулярных фрагментов, соединенных гибкими связями, (б) применении новых (advanced) моделей точечных зарядов, полученных аппроксимацией квантовомеханического электростатического потенциала молекулы, а также (в) моделей вандерваальсовых ААП, внутримолекулярных гармонических и торсионных потенциалов, уточненных по базе экспериментально изученных кристаллических структур и их измеренных физико-химических свойств: энтальпий сублимации и полиморфных ФП, модулей упругости, частот внешних колебаний и т.п.

В решении проблемы эффективно используются как программы автора: PMC (минимизация энергии), CRYCOM (сравнение структур), FitMEP (аппроксимация электростатического потенциала молекулы эффективными зарядами), FitPTL (оптимизация параметров ААП), так и общеизвестные программы квантовохимического расчета молекул, а также информация и поисковые средства Кембриджского банка структурных данных (CSD).

В докладе представлены примеры предсказанных и независимо подтвержденных структур органических кристаллов, в числе которых структуры полимеризованных фаз C_{60} и C_{70}, а также тестовые задачи Кембриджских (слепых) тестов методов предсказания органических кристаллических структур.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 14-03-01091.

ДРЕМЛЮЩИЙ ХАОС: ПРИЛОЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВА ДЕТЕКТИРОВАНИЯ

Егоров В.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
DOI: 10.13140/RG.2.1.2443.2246
e-mail: egorov@photonics.ru

Дремлющий хаос (ДХ) есть главный элемент в динамической самоорганизации переходного состояния (ПС) молекулярных квантовых переходов (МКП). Необходимость введения его в теорию следует из наличия существенной сингулярности в вероятностях (в ед. вр.) МКП, которая возникает в результате выхода за рамки адиабатического приближения в квантовой механике электронно-ядерного движения. ДХ отсутствует в начальном и конечном состоянии, и возникает только в ПС. С помощью ДХ легким электронам удается управлять движением чрезвычайно тяжелых ядер, делая его хаотическим. В результате хаотизации движения ядер в ПС, колебательное движение ядер частично трансформируется в поступательное движение их положений равновесия к новым положениям, отвечающим конечному электронному состоянию. По мере того как электронный заряд локализуется в конечном состоянии, поступательное движение ядер возвращается в их колебательное движение, но уже относительно новых положений равновесия. Этот процесс приводит к устранению сингулярности в вероятностях МКП. В случае сильного ДХ (слабая динамическая самоорганизация ПС) результат для вероятностей МКП перестает зависеть от динамики ПС и выглядит так, как если бы ПС не существовало. Вот почему ДХ так долго ускользал от внимания исследователей. В случае сильного ДХ, результат для вероятностей МКП в теории, построенной на основе концепции ДХ, переходит в хорошо известный стандартный результат.

Формально, ДХ вводится как мнимая часть в электронно-ядерном взаимодействии в динамике ПС в МКП путем замены хорошо известной бесконечно малой мнимой добавки $i\gamma$ в энергетическом знаменателе полной функции Грина системы на некоторое конечное значение. Эта простая процедура снимает запрет на обмен движением и энергией между электронами и ядрами в ПС МКП, который по существу присутствует в стандартной квантовой механике в результате использования адиабатического приближения. Из детального сравнения теории с экспериментом следует, что величина γ настолько велика (намного больше величины колебательного кванта ядер), что вышеуказанный взаимообмен приводит к хаосу в движении электронов и ядер. Этот хаос и называется ДХ. ДХ является универсальной физической субстанцией, универсальной в той же степени, в какой являются сами электроны и ядра.

Новая квантовая теория, основанная на концепции ДХ, позволяет осмыслить целую серию фундаментальных экспериментальных результатов в химии, которые не поддавались объяснению в рамках стандартной квантовой механики электронно-ядерного движения в течение многих десятков лет. К этим результатам относятся формы оптических полос полиметиновых красителей и их агрегатов, хорошо известные соотношения Бренстеда в реакциях переноса протона, температурная зависимость переноса электрона в пленках Лэнгмюра-Блоджетт и т.д. [1]. Наиболее ярким примером применения новой теории служит форма оптической полосы известных J-агрегатов полиметиновых красителей. МКП в главном хромофоре их мономеров, полиметиновой цепи, могут приближенно рассматриваться как протяженные квантовые переходы в донорно-акцепторной системе, погруженной в конденсированную среду (т.е., как элементарный перенос электронного заряда в среде). Природа аномально узкой и интенсивной J-полосы, сдвинутой относительно полосы мономера в красную область спектра, объясняется хорошей динамической самоорганизацией МКП в хромофоре J-агрегатов (четыре молекулы, образующие структуру типа кирпичной кладки), при которой динамика ядерного окружения в условиях слабого ДХ способствует электронному переходу в J-хромофоре.

ДХ является причиной не только МКП, но также и всего многообразия химических реакций, и как следствие, является источником эволюции молекулярной материи, вплоть до возникновения живой материи и самого человека [2].

Для уверенности в достоверности новой физической картины МКП и с целью управления ДХ в перспективе, необходимо осуществить его прямое детектирование [2]. В этой связи изучение ядерной динамики при потере регулярности молекулярной структуры в хаотическом ПС МКП является одним из важнейших элементов изучения ДХ. Исследования структурной динамики с использованием экспериментальных методов кристаллографии могут сыграть одну из ключевых ролей в изучении такой хаотической динамики ПС. Большой интерес представляет также детектирование флуктуирующего электромагнитного излучения «внутри молекулы» в безызлучательных переходах, которое является составным элементом ДХ, методами спектроскопии одиночных молекул и наноплазмоники. В качестве удобных объектов для детектирования ДХ могут выступать, например, полиметиновые красители и их J-агрегаты, имеющие ярко выраженную линейную геометрию, а также клетки, ткани и простейшие живые организмы, которые являются предметом изучения синтетической биологии, впрочем, как и вся живая материя в целом, в особенности головной мозг или раковая опухоль, где из общих соображений ДХ должен быть сосредоточен в наибольшей степени [2]. Рентгеновские лазеры на свободных электронах [3] могут стать одним из ключевых инструментов для исследования природы ДХ.

[1] Егоров В.В., Алфимов М.В. // УФН, 2007, том 177, № 10, с 1033; Petrenko A., Stein M. // J Phys Chem, 2015, 119, 6773; Egorov V.V. // AIP Adv, 2014, 4, 077111; RSC Adv, 2013, 3, 4598; in Chaos and Complex Systems, S.G. Stavrinides et al. (eds.), 2013, Springer, Berlin, p 219; J Lumin, 2011, 131, 543; Phys Proc, 2009, 2, 223; Russ J Electrochem, 2003, 39, p 86; J Chem Phys, 2002, 116, 3090; Chem Phys, 2001, 269, 251; Thin Solid Films, 1996, 284–285, 932; Russ J Phys Chem, 1990, 64, 1245.

[2] Egorov V.V. // in Chaos and Complex Systems, S.G. Stavrinides et al. (eds.), 2013, Springer, Berlin, p 41; in 12th Experimental Chaos and Complexity Conference, May 16–19, 2012, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA, http://ecc12.physics.lsa.umich.edu/abstracts.php.html; in 243rd ACS National Meeting & Exposition, March 25–29, 2012, San

Diego, California, USA, http://abstracts.acs.org/chem/243nm/program/view.php?pub_num=282&par=BIOL; in 43rd World Chemistry Congress IUPAC, July 31 – August 5, 2011, San Juan, Puerto Rico, Book of Abstracts (1266), p 447.

[3] Pellegrini C., Marinelli A., Reiche S. // Rev Mod Phys, 2016, 88, 015006.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛЕНОК ЦТСЛ

Жигалина О.М.[1], Хмеленин Д.Н.[1], Колосов В.Ю,[2] Котова Н.М.[3], Воротилов К.А. [3]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Уральский федеральный университет, Екатеринбург

[3]МГТУ МИРЭА

e-mail: zhigal@ns.crys.ras.ru

Легирование пленок ЦТС лантаном сохраняет сегнетоэлектрические свойства и снижает токи утечки на два порядка. Такие материалы можно использовать для СЗУ, инфракрасных сенсоров, пьезоэлектрических микроактюаторов и МЭМС. При химическом осаждении из растворов пленка кристаллизуется из аморфного состояния с образованием фазы перовскита, при этом возникают значительные внутренние напряжения, которые определяют уровень электрофизических характеристик и могут вызвать локальные искажения кристаллической решетки. Целью данной работы было ПЭМ-исследование влияния La на структурное состояние перовскита для композиций ЦТС-Pt-TiO_2-SiO_2-Si.

Установлено, что легирование La повышает температуру превращения пирохлор-перовскит (Py–Pe). При увеличении содержания La от 2 до 10 мол.% в пленках наблюдается усиление текстуры (100), изменение периодов решетки и степени тетрагональности Pe (рис.1а). Так как ионный радиус La3+=1,21 A; а Pb2+=1,31 Å, то доминирование ориентации (100) может быть результатом увеличения разницы периодов решеток пленки и Pt подложки при замещении свинца лантаном в решетке Pe. ПЭМ-исследование локального искажения решётки в зернах Pe по зонно-осевым картинам пересекающихся изгибных экстинкционных контуров (рис.1б) показало, что в кристаллизующейся фазе при содержании La 8-10 мол/% наблюдаются сильные удельные разориентировки кристаллической решётки, превышающие значения 100 градусов на 1 мкм (изгиб вокруг осей, лежащих в плоскости плёнки). Ранее показано [1], что это внутренние искажения решётки (“трансротационного” характера), которые, как мы полагаем, реализуются и в данном случае.

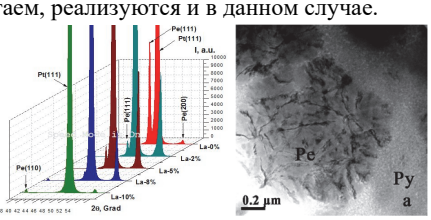


Рис.1. Дифрактограммы ЦТСЛ(а), кристаллы Pe с искажениями решетки (б).

[1] Kolosov V. Yu., Tholen A. R.//Acta Mater., 2000, 48, 1829-1840.

МАГНИТОСТИМУЛИРОВАННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА С ПЕРИОДИЧЕСКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПРИМЕСЕЙ

Иванова Е.С., Румянцев И.Д., Петржик Е.А., Гайнутдинов Р.В., Толстихина А.Л., Белугина Н.В.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: ivanova.el.ser@gmail.com

Уникальные характеристики сегнетоэлектрических кристаллов во многом обусловлены их доменной структурой. Важной задачей является формирование регулярной структуры с заданными свойствами. Один из способов решения – выращивание кристаллов с легированными примесями зонами, распределенными определенным образом по объему. Цель данной работы заключалась в изучении диэлектрических свойств кристаллов триглицинсульфата (ТГС) с периодическим распределением примесей внедрения (Cr) и замещения (α-аланин); сравнении с номинально чистыми кристаллами ТГС и кристаллами с равномерным распределением примесей; а также исследовании влияния постоянного магнитного поля на эти свойства. Для изучения доменной структуры использовали электрическую модификацию метода АСМ – микроскопию пьезоэлектрического отклика.

Обнаружено изменение параметров петли диэлектрического гистерезиса после экспозиции образцов в постоянном магнитном поле. Для кристаллов с примесью внедрения (Cr) эффект анизотропен: при приложении поля перпендикулярно полосам роста наблюдается уменьшение ширины петли (правая кривая на рис.1), при параллельности вектора магнитной индукции и полос роста - увеличение (левая кривая на рис.1). По данным АСМ в полосах с примесью Cr сегнетоэлектрические домены расположены перпендикулярно границам роста. В кристаллах с примесью замещения (аланин) также обнаружено магнитостимулированное изменение диэлектрических свойств, но со своими особенностями, связанными с доменной структурой данных кристаллов.

Авторы благодарят Институт технической акустики НАН Беларуси за предоставленные образцы и Президиум РАН (Программа № 1) за поддержку.

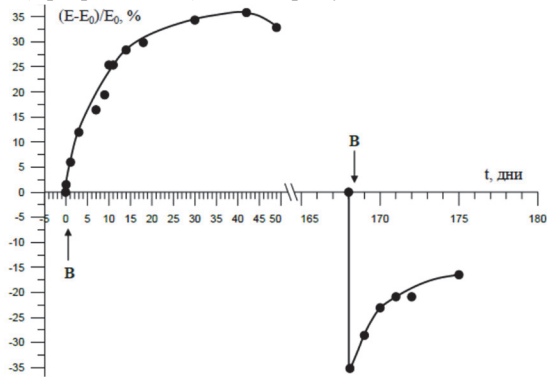


Рис.1. Зависимость относительной ширины петли диэлектрического гистерезиса от времени. Стрелками показано, когда прикладывалось постоянное магнитное поле.

КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ В АНОМАЛЬНОЙ СИСТЕМЕ $Ce(Nd)Fe_2Al_{10}$: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Клементьев Е.С.[1,2], Алексеев П.А.[3,4], Миньо Ж.М.[5], Адрожа Д.Т.[6]
[1] *НОЦ «Фукнциональные наноматериалы», БФУ им Канта*
[2] *Институт Ядерных Исследований РАН*
[3] *НИЦ «Курчатовский Институт»*
[4] *НИЯУ МИФИ*
[5] *Лаборатория Леона Бриллюэна, Сакле, Франция*
[6] *Лаборатория Резерфорда-Апплтона, Дидкот, Великобритания*
e-mail: EKlementev@kantiana.ru

Интерметаллическая система $CeFe_2Al_{10}$ орторомбической симметрии (пространственная группа Cmcmc) относится к уникальному классу Кондо-изоляторов и демонстрирует спиновую щель и резонансную магнитную моду. Важную роль в формировании необычного основного состояния и аномальных физических свойств играет потенциал кристаллического электрического поля (КЭП). В данной работе определены параметры КЭП и рассчитано расщепление основного 4f мультиплета ионов церия. Экспериментальная информация об эффектах КЭП было получена при помощи метода неупругого рассеяния нейтронов и использования изоструктурного соединения с ионами Nd с хорошо локализованными магнитными моментами. Задача определения истинных параметров затруднялась низкой локальной симметрией (орторомбической) в позициях редкоземельных ионов. Был разработан новый метод количественного анализа эффектов КЭП в нейтронных спектрах. Полученная информация играет важную роль для создания физической картины семейства CeT_2Al10 (T=Fe, Ru, Os), демонстрирующего эволюцию от Кондо-изолятора до состояний с необычным дальним магнитным порядком. Благодарим РФФИ за частичную поддержку работы, проекты 14-02-01096-а и 14-22-01002-офи_м.

[1] Mignot J.-M., Alekseev P.A., Robert J. et. al // Physical Review B, 2014, v. 89, 161103.

НАУЧНАЯ АППАРАТУРА «БЕЛКА» ДЛЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БЕЛКОВ В УСЛОВИЯХ МИКРОГРАВИТАЦИИ И ЕЁ АПРОБАЦИЯ

Ковалёв С.И.[1], Крамаренко В.А.[1], Задорожная Л.А.[1], Баскакова С.С.[1], Лясникова М.С.[1], Дымшиц Ю.М.[1], Шишков В.А.[1], Волошин А.Э.[1], Ковальчук М.В.[1,2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
e-mail: skovalev@crys.ras.ru

Сегодня целый ряд направлений биологии, медицины и фармакологии нуждаются в точном знании пространственной структуры белковых молекул. Необходимым условием достижения высокого пространственного разрешения является высокое структурное совершенство монокристаллов исследуемого вещества. Отсутствие гравитации в условиях космоса и, как следствие, отсутствие конвективных потоков в объёме раствора в значительной степени решают эту проблему.

По результатам анализа проведённых ранее исследований нами были сформулированы требования к аппаратуре нового поколения:

- управляемые начало и окончание процесса кристаллизации,
- медленный подъём пересыщения на начальном этапе процесса,
- равномерное или с небольшим градиентом распределение пересыщения по объёму раствора.

В соответствии с указанными требованиями в составе научной аппаратуры (НА) «БЕЛКА» были разработаны и изготовлены два устройства для выращивания кристаллов белков: «УК-1» – методом жидкостной диффузии в капиллярах, «УК-2» – методом паровой диффузии на подложках. В 2013 г. и 2014 г. на борту космических аппаратов «Бион-М» № 1 и «Фотон-М» № 4 проведены эксперименты по кристаллизации восьми различных белков (лизоцим, глюкозоизомераза, APHVIII, 2Q02, 2PMB, 3E8O, 2Q9K, 2FCL) в устройствах «УК-1» и «УК-2» НА БЕЛКА. В результате получены прозрачные кристаллы всех белков. При росте лизоцима и белка 2Q9K на подложках образовались биокристаллические плёнки площадью более 4 $мм^2$. Оптические исследования кристаллов глюкозоизомеразы показали, что при срастании одинаково ориентированных кристаллитов образуются квазимонокристаллические блоки. Рентгенодифракционный эксперимент показал, что для кристаллов лизоцима, полученных в наземных условиях, разрешающая способность составляет 1.74 Å, полученных в космическом эксперименте – 1.58 Å.

ТРАНСРОТАЦИОННЫЕ МИКРОКРИСТАЛЛЫ, ВЫЯВЛЯЕМЫЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИЕЙ

Колосов В.Ю.
Уральский федеральный университет
e-mail: kolosov@urfu.ru

Электронно-микроскопическим методом изгибных контуров обнаружены необычные кристаллы, растущие в тонких аморфных плёнках (20-100 нм) с сильным внутренним (недислокационным) изгибом кристаллических плоскостей решетки [1]. Вслед за Se и Te постоянно добавляются (в т.ч. *in situ*) примеры других веществ, материалов разных химических связей и условий синтеза (Se-C, Se-Te, Sb_2Se_3, Sb_2S_3, Ge-Sb_2Se_3, Ge-Te, Tl-Se, Cu-Te, α-Fe_2O_3, Cr_2O_3, Co-Pd, Re, W, карбиды, аморфные металлы, сегнетоэлектрики, фазоизменяемые материалы и др.) [2-4], в т.ч. других авторов.

Особенность “трансротационной” [4] микро-, наноструктуры - регулярный изгиб/искривление плоскостей решетки (вокруг осей, лежащих в плоскости плёнки) при её росте в аморфной плёнке, рис. 1. Упрощённое описание: трансляция дополнена небольшим поворотом элементарной ячейки, и в результате достигаются существенные суммарные развороты, до 300° на 1 мкм длины. Геометрия и градиент ориентировки решетки зависят от кристаллографии зародыша, скорости роста, толщины плёнки и состава.

Предложенный гипотетический механизм необычного явления основан на поверхностной нуклеации, а атомистическая модель - на конформных отображениях. Трансротации можно рассматривать как новый вид протяжённых дефектов (в тонких кристаллах), дополняющих дисклинации (в жидких кристаллах) и дислокации.

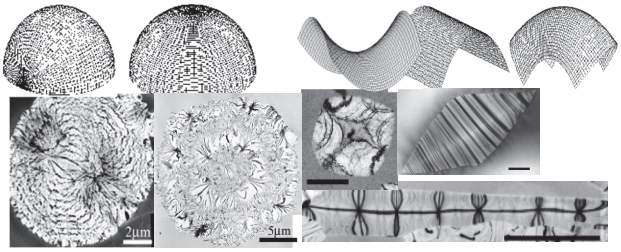


Рис.1. Схема геометрии плоскостей трансротационных решёток и ПЭМ снимки кристаллов Se, Fe_2O_3, Ta_2O_5, C+Se+C, Cu-Te. Метка = 1 мкм (где не указано).

[1] I.E. Bolotov, V.Yu. Kolosov, A.V. Kozhyn, Phys. Stat. sol. 1982, 72a, 645-654.

[2] V.Yu.Kolosov, A.R. Thölén, Acta Mater. 2000, 48, 1829-1840.

[3] V.Yu. Kolosov, Acta Cryst. A 2011, 67, C695 http://journals.iucr.org/a/issues/2011/a1/00/a48359/a48359.pdf

[4] V. Kolosov, Proc. 15 EMC, 2012, Manchester, UK, V. 1, p. 1021-1022 (www.emc2012.org.uk/proceedings)

*Поддержано грантами МОН.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСВИТКОВ

Красилин А.А., Гусаров В.В.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе
e-mail: ikrasilin@gmail.com

Формирование ряда нанотубулярных структур, прежде всего, наносвитков некоторых неорганических соединений происходит путём сворачивания кристаллического слоя. Движущей силой этого процесса выступает асимметрия строения кристаллического слоя, проявляющаяся в виде размерного несоответствия составляющих подслоев, или различия в значениях поверхностной энергии противоположных сторон слоя. Характерными примерами являются структуры типа хризотила, галлуазита, имоголита и другие моно- и поликристаллические асимметричные слои.

Качественное отличие термодинамического состояния тубулярной и пластинчатой форм вещества позволяет рассматривать сворачивание не только как морфологическую трансформацию, но и как своеобразный фазовый переход. В докладе рассматривается проблема описания критического состояния при образовании зародыша наносвитка, а также предлагается энергетическая модель образования и роста кристаллических наносвитков.

С использованием модели проанализированы возможные механизмы формирования кристаллических наносвитков. Показаны условия формирования нанотубулярной структуры в виде двусвязной нанотрубки или односвязного наносвитка. Определена равновесная (метастабильная) форма наносвитка в зависимости от его объема. Предсказана возможность (энергетическая предпочтительность) самодробления наносвитка при его радиальном росте до определенных критических значений. Теоретически обоснованы наблюдаемые экспериментально [1, 2] эффект распределения изоморфных атомов по слою переменной кривизны и связанное с этим эффектом явление полигонизация внешних слоёв свитка начиная с определенного критического значения кривизны слоя.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-10252).

[1] Красилин А.А., Гусаров В.В. // Письма в ЖТФ, 2016, том 42, № 2, с 1-8.

[2] Krasilin A.A. et al. // Materials Letters, 2016, vol. 171, p. 68-71.

СТРУКТУРНАЯ СЛОЖНОСТЬ МИНЕРАЛОВ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ: ТЕОРИЯ И ПРИМЕНЕНИЕ

Кривовичев С.В.

Санкт-Петербургский государственный университет
Институт химии силикатов РАН
e-mail: s.krivovichev@spbu.ru

Интерес к сложности кристаллических структур появился еще в 1920-х годах – когда Полинг сформулировал свое правило парсимонии – так называемое пятое правило Полинга, утверждавшее, что число различных элементов в кристаллической структуре стремится к минимуму. Однако, попытки численной оценки сложности структуры неизбежно наталкивались на трудности, связанные с невозможностью сочетания в одном параметре таких двух аспектов сложности, как симметрия и размер системы (для кристаллов в качестве системы достаточно выбрать элементарную ячейку). В ряде последних работ [1-4] нами было показано, что оценки сложности кристаллических структур на основе теории информации позволяют дать количественное описание структурной сложности минералов и неорганических соединений, которое можно применить для анализа процессов метастабильной кристаллизации и распространенности структурных типов [3]. Фундаментальное значение сложности структуры состоит в ее связи с конфигурационной энтропией кристаллов: чем выше сложность, тем ниже конфигурационная энтропия [4].

[1] Krivovichev S.V. Topological complexity of crystal structures: quantitative approach // Acta Crystallogr. 2012. Vol. A68. P. 393-398.

[2] Krivovichev S.V. Which inorganic structures are the most complex? // Angew. Chem. Int. Ed. 2014. Vol. 53. P. 654–661.

[3] Krivovichev S.V. Structural complexity of minerals: information storage and processing in the mineral world // Mineral. Mag. 2013. Vol. 77. P. 275-326.

[4] Krivovichev S.V. Structural complexity and configurational entropy of crystalline solids // Acta Crystallogr. 2016. Vol. B72. P. 274-276.

ДОПИРОВАНИЕ - ИНТЕНСИВНЫЙ ФАКТОР ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ И СВОЙСТВА ОКСИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Кузьмичева Г.М.[1], Каурова И.А.[1], Рыбаков В.Б.[2], Ивлева Л.И.

[1]Московский технологический университет, МИТХТ
[2]Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова
[3]Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН
galina_kuzmicheva@listl.ru

Допирование (активирование) - одно из необходимых действий для реализации, улучшения, изменения свойств кристаллов большого размера, полученных наиболее технологичными расплавными методами. При этом необходимо знать состав кристаллов, в большинстве случаев не совпадающий с составом шихты, за исключением конгруэнтно плавящихся соединений, и местонахождение допантов (ДП) в структуре кристаллов, вводимых в количестве 0.01-10 вес.%, для понимания наблюдаемых эффектов и направленного получения образцов с необходимыми свойствами. Решению этих задач посвящена данная работа.

На основании дифракционных данных и кристаллохимического анализа разработана методология изучения оксидных кристаллов разных семейств (граната, шеелита и др), которая позволила:

-предложить параметры ячейки в качестве индикатора состава и критерия границ применения дифракционных методов для оценки влияния ДП на структуру кристаллов;

- определить реальные составы (все виды точечных дефектов и их концентрация) и реальную структуру микрочастей (рентгенография), макрочастей (нейтронография) и измельченных в порошок (рентгеновское и синхротронное излучение) кристаллов $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$ (SBN) и SBN:Cr^{3+}/Ni^{2+}; $SrMoO_4$ (SMO) и SMO:Ho^{3+}/Tm^{3+}; $PbMo(W)O_4$ (PM(W)O) и PM(W)O:Y^{3+}/Nd^{3+};

- установить структурное положение ДП и их формальные заряды в зависимости от структуры и состава кристалла, вида вводимого ДП (NiO и Cr_2O_3 в SBN; Tm(Ho)NbO_4 в SMO; $YNbO_4$ в PM(W)O); Nd_2O_3, $Nd_2(MoO_4)_3$, $NaNd(MoO_4)_2$, $NdNbO_4$ в PMO);

- выявить симметрию кристаллов семейства шеелитов и механизмы ее изменения при допировании..

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки РФ (№ 4.745.2014/K; 2014-2016).

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ БЕЛКОВ В НЕВЕСОМОСТИ

Куранова И.П., Самыгина В.Р., Тимофеев В.И.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
НИЦ «Курчатовский институт»

Исследование пространственной структуры белков с применением метода рентгеноструктурного анализа начинается с приготовления монокристалла, дающего четкую дифракционную картину при достаточно высоком разрешении. Важность результатов структурных исследований биомакромолекул для фундаментальной науки, медицины и биотехнологии стимулировала развитие работ по выращиванию кристаллов белков высокого дифракционного качества. Качество кристалла в значительной степени определяется условиями роста, в том числе условиями транспорта молекул к растущему кристаллу. Известно, что при выращивании кристаллов белков в невесомости, где минимизированы конвекционные потоки и транспорт осуществляется преимущественно посредством диффузии, образуются кристаллы, дифрагирующие до более высокого разрешения по сравнению с выращенными на Земле в тех же условиях [1, 2].

В докладе рассматриваются эксперименты по росту кристаллов белков в невесомости методами свободной и встречной диффузии, проводимые в рамках проекта «Кристаллизатор». Приведены примеры пространственных структур белков, установленных с использованием выращенных кристаллов.

[1] И.П. Куранова ПОВЕРХНОСТЬ 2004 №6, с. 6-14

[2] В. И. Стрелов, И. П. Куранова, Б. Г. Захаров, А. Э. Волошин КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2014, том 59, № 6, с. 863–890

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПРОЦЕССЫ РОСТА НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ

Латышев А.В.
ФГБУН Институт физики полупроводников
им. А.В .Ржанова СО РАН
e-mail: latyshev@isp.nsc.ru

Знание атомных процессов при синтезе новых материалов является ключевым моментом для контролируемого получения низкоразмерных систем на основе высокосовершенных модулированных структур, сверхрешеток, квантовых низкоразмерных систем. Это обуславливает необходимость создания тонких пленок с заданным составом, структурой, уровнем легирования и высоким качеством структуры границ раздела, что обусловлено высокой чувствительностью электронных и оптических свойств материала к дефектам и неоднородностям структуры.

Представлены результаты исследований атомных процессов, протекающих на поверхности кремния при сублимации, адсорбции, эпитаксиальном росте, термическом отжиге и газовых реакциях, полученные с помощью разработанного в ИФП СО РАН уникального диагностического метода — *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии. С помощью этого метода получен ряд принципиально новых результатов таких как: обратимый эффект эшелонирования моноатомных ступеней; открытие эффективного заряда адатомов; эффект смещения ступеней при сверхструктурном переходе; эффект группирования ступеней при реконструкции; разработана технология формирования экстра больших террас (атомарное зеркало); определен ряд количественных параметров и т. д.

[1] Rogilo D., Fedina L., Kosolobov S., Latyshev A. // J. Crystal Growth, 2016, http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.06.028

[2] Sitnikov S., Kosolobov S., Latyshev A. // Surface Science Letters, 2015, V. 633, p L1-L6.

[3] Sitnikov S., Latyshev A., Kosolobov S. // J. Crystal Growth, 2016, http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.05.048

[4] Latyshev A. et al. Atomic processes on silicon surface, in: “Advances in Semiconductor Nanostructures: Growth, Charac-terization, Properties and Applications”, Eds. A. Latyshev, A. Dvurechenskii, A. Aseev, 2016, Elsevier Science & Tech, p.548.

НАНОКОМПОЗИТЫ ZnO@Si(100) И ZnO@Si(111): ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ, МОРФОЛОГИЯ И СПЕКТРАЛЬНО-ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Ли Л.Е.[1], Шапиро А.Я.[1], Сенина В.А.[2], Горюнов Г.Е.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *ФГБОУ ВО «МГУ имени М.В.Ломоносова»*
e-mail: lyuli@ns.crys.ras.ru

Оксид цинка –широкозонный полупроводник (ΔE~3.37 eV), обладающий набором уникальных физических свойств. Экстремально высокое для полупроводников группы $A^{II}B^{VI}$ значение энергии связи экситона (60 мэВ) обеспечивает существование УФ-люминесценции и лазерной генерации вплоть до температуры 550K. Микроструктуры на базе этого материала вызывают особый интерес исследователей, в связи с получением на них новых интересных свойств, отличных от объемных кристаллов [1].

Задачами проведенных исследований было:

- получение микрокристаллитов ZnO на подложках разной кристаллографической ориентации – Si (100) и Si (111);
- исследование морфологии и генерационных характеристик синтезированных объектов ZnO @ Si (100) и ZnO @ Si (111);

Нанокомпозиты ZnO@Si (111) ZnO@Si (000) высокого оптического качества были синтезированы в мягких гидротермальных условиях. Исследование морфологии полученных образцов показало, что вся поверхность Si (111) была покрыта микростержнями ZnO, в то время как на поверхности Si (100) микростержни наблюдались только по краю подложки. Синтезированные объекты демонстрировали УФ лазерную генерацию при возбуждении излучением 3 гармоники лазера YLF:Nd^{3+} (351 нм). Лазерная генерация регистрировалась только в областях подложек, где наблюдались микростержни - на Si (111) по всей поверхности подложки, на Si (100) только по краю.

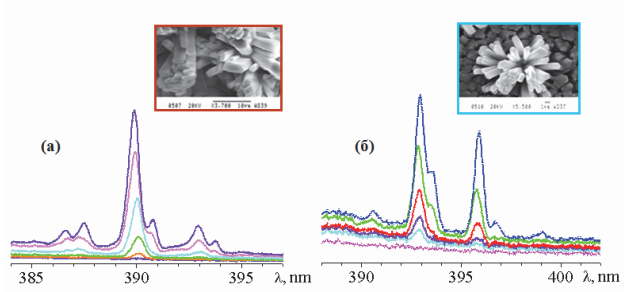


Рис. Спектры лазерной генерации ZnO@Si: (а) – ZnO@Si(111) и (б) – ZnO@Si(001) по краю подложки. На врезках приведены СЭМ изображения этих образцов.

Таким образом, на примере Si подложек показана связь характеристик лазерной генерации ZnO с морфологическими типами синтезированных кристаллитов ZnO, которые в свою очередь контролируются параметрами структурообразующих элементов ростовой системы (подложек различного состава и разной кристаллографической ориентации).

[1] Demyanets L.N., Li L.E., et al.// J.Mater. Sci., 2008 , Vol. 43, P. 2140-2148.

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ СЕМЕЙСТВА ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ЛАНГАСИТОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Любутин И.С.[1], Гаврилюк А.Г.[1, 2], Старчиков С.С.[1], Троян И.А.[1], Никифорова Ю.А.[1], Иванова А.Г.[1], Дмитриева Т.В.[1]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН; 119333 Москва*
[2] *Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва*
e-mail: lyubutinig@mail.ru

Кристаллы семейства лангасита ($La_3Ga_5SiO_{14}$) вызывают большой научный и практический интерес из-за высоких параметров пьезоэлектрических, акустооптических и лазерных свойств. Недавно открыты новые соединения этого типа, содержащие магнитные катионы $A_3MFe_3X_2O_{14}$ (A = Ba, Sr; M = Sb, Nb, Ta; X = Si, Ge) [1,2]. Ожидаемое сосуществование электрического и магнитного параметров порядка в таких системах может привести к созданию нового класса мультиферроиков. Очень важной для практики является проблема повышения точки Нееля в таких соединениях, например, при приложении внешнего давления или за счет катионного замещения, которое может создавать «внутреннее» давление.

В настоящей работе проведены синхротронные мессбауэровские и рентгенографические исследования структурных и магнитных свойств железосодержащих лангаситов при высоких гидростатических давлениях до 60 ГПа, создаваемых в камерах высокого давления с алмазными наковальнями, а также изучены рамановские спектры. При воздействии давления обнаружена серия структурных фазовых переходов, которые сопровождаются резким изменением магнитных свойств [3]. В частности, в некоторых кристаллах при давлении выше 20 ГПа происходит переход на новую магнитную фазу с огромным (четырехкратным) увеличением температуры Нееля. Из экспериментальных данных построены магнитные P-T фазовые диаграммы этих соединений.

Работа выполнена при поддержке Гос. контракта Минобрнауки РФ № 14.616.21.0068, а также грантами РНФ № 16-12-10464, РФФИ № 14-02-00483 и РАН III.2П.

[1] B.V. Mill, E.L. Belokoneva, T. Fukuda, Russian J. Inorg. Chem. 1998, 43, c.1168.

[2] I.S. Lyubutin et al., Phys. Rev. B, 2011, 84, c. 214425.

[3] И.С. Любутин, А.Г. Гаврилюк, Ю.А. Давыдова, и др. Письма ЖЭТФ, 2014, 100, №12, с. 904.

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Макарова И.П.[1], Селезнева Е.В.[1], Гребенев В.В.[1], Коморников В.А.[1], Васильев А.Л.[2]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: makarova@crys.ras.ru

Структурные исследования являются центральным звеном при установлении взаимосвязи между составом, структурой и свойствами кристаллов с целью создания функциональных материалов. Взаимодополняющие рентгеновские, нейтронографические и электронномикроскопические методы позволяют определить структуру материалов, а также тонкие изменения при фазовых переходах и изоморфных замещениях.

Растущие темпы энергопотребления стимулируют интерес к разработкам альтернативных источников энергии. Кристаллы-суперпротоники $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2}\cdot xH_2O$ являются перспективными материалами для создания протонообменных мембран топливных элементов. Проводимость суперпротоников связана со структурными особенностями и не зависит от легирующих добавок или дефектов реальной структуры. Структурные данные показывают разнообразие механизмов изменений их свойств: формирование динамически разупорядоченной системы водородных связей [1], диффузия воды, перестройка системы связей и формирование каналов ионов M [2,3], статистическое замещение групп AO_4 и уменьшение числа Н-связей [4,5], формирование многофазного состояния [6].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ № СП-1445.2016.1.

[1] Макарова И.П. // Физика твердого тела, 2015, том 57, № 3, с. 432-439.

[2] Makarova I., Grebenev V., Dmitricheva E. et.al // Acta Cryst. B, 2014, volume 70, p. 218-226.

[3] Dmitricheva E., Makarova I., Grebenev V. et.al // Solid State Ionics, 2014, volume 268, p. 68-75.

[4] Макарова И.П., Гребенев В.В., Васильев И.И. и др.// Кристаллография, 2015, том 60, № 4, с. 552-561.

[5] Makarova I., Grebenev V., Dmitricheva E. et.al // Acta Cryst. B, 2016, volume 72, p. 133-141.

[6] Mikheykin A., Chernyshov D., Makarova I. et al // Solid State Ionics, 2016, in press.

СТРУКТУРНЫЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСЛОЕВ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Мишина Е.Д., Лавров С.Д., Шестакова А.П., Сигов А.С.
Московский технологический университет (МИРЭА)
e-mail: mishina_elena57@mail.ru

Монослои дихалькогенидов переходных металлов (MoS_2, WS_2 и т. п.) рассматриваются в качестве материалов двумерной электроники, которые могут дополнить графен при создании устройств наноэлектроники. В отличие от графена, у которого запрещенная зона отсутствует, двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) обладают запрещенной зоной порядка Eg ~ 1.2−1.4 эВ [1], превращаясь из непрямозонных объемных полупроводников в прямозонные, что обеспечивает их эффективное использование при создании устройств оптоэлектроники.

Монослои ДПМ в настоящее время могут быть получены либо осаждением на подложку, либо методом химической или механической эксфолиации из совершенных объемных кристаллов, последние обладают минимальной дефектностью и наилучшими функциональными свойствами.

В данной работе представлены результаты исследования структуры и функциональных свойств нанослоев ДПМ (MoS_2, WS_2 и их твердых растворов) оптическими методами, позволившие создать экспериментальный образец фотосопротивления на основе эксфолиированной монослойной структуры MoS_2.

Монослойные микроструктуры ДПМ, как правило, имели латеральные размеры порядка 10 мкм. Отбор монослоев проводился методом фотолюминесценции (ФЛ) основанной на экспоненциальной зависимости интенсивности экситонной ФЛ от толщины слоя и дополнительного контроля методом атомно-силовой микроскопии. Структурное совершенство и кристаллографическая ориентация монослойных микрокристаллитов исследовались методом генерации второй оптической гармоники. Все эксперименты проводились на модифицированном универсальном микроскопе Alpha300s$^+$ (WITec), в котором в качестве возбуждающего источника излучения использовался фемтосекундный лазер на кристалле сапфира, допированного ионами титана. По результатам оптических исследований отбраковывались структуры с толщиной более одного монослоя, а также обладающие краевыми дефектами [2].

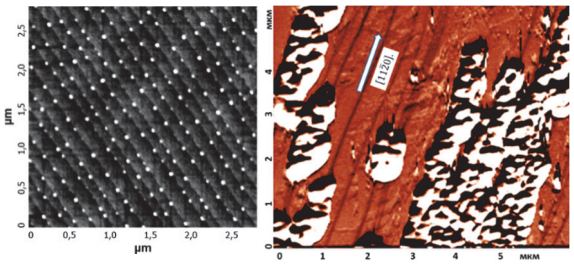
[1] Lee H.S., Min S.-W. et al. // Nano Lett., 2012, v. 12, p. 3695.

[2] Мишина Е.Д, Шерстюк Н.Э. и др.// Физика и техника полупроводников, 2015, том 49, с. 810.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННАЯ ПОВЕРХНОСТЬ, КАК ОТРАЖЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ. ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ В ТЕХНОЛОГИЯХ

Муслимов А.Э., Буташин А.В, Власов В.П, Каневский В.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Известно [1], что даже идеально полированная поверхность монокристаллической пластины (полное отсутствие нарушенного слоя на поверхности) может быть наноструктурированной. В процессе огранки на поверхности монокристалла формируется система атомно-гладких ступеней. Террасы ступеней могут содержать структурные перегруппировки атомов по отношению к регулярной упаковке кристаллографической структуры, но, при этом, высота ступеней будет ей соответствовать. Такие наноструктурированные поверхности могут найти широкое применение в современных технологиях. Однако отсутствие методик управления параметрами наноструктур (высотой ступеней, шириной террас), на сегодняшний день, ограничивают их использование. В работе рассмотрены возможности управления параметрами наноструктурированной поверхности кристаллов, на примере Al_2O_3, V_2O_5 в зависимости от внешних воздействий, а также их применение в современных технологиях. Описаны преимущества сапфировых подложек с наноструктурированной и нитридизованной поверхностью для формирования гетероэпитаксиальных полупроводниковых пленок ZnO и продемонстрировано повышение их олеофобности в результате отжига. Предложена методика эпитаксии пленок CdTe напылением под углом (рис.1а) на структурированные подложки сапфира, а также методика формирования упорядоченных ансамблей наночастиц золота (рис.1б). В дополнении, рассмотрена возможности целенаправленного формирования регулярного микро-, тонких переходных слоев путем термического воздействия.



а) б)

Рис.1. АСМ-изображения поверхности: начальные стадии роста CdTe а); упорядоченный ансамбль частиц Au б).

[1] Дунаевский М.С., Макаренко И.В., Петров В.Н., и др. //ПЖТФ. 2009. Т.35. В. 1 С.98.

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КВАРЦИТАХ ВОСТОЧНОГО САЯНА

Непомнящих А.И., Жабоедов А.П., Пресняков Р.В., Сапожников А.Н.
Институт геохимии им. А.П.Виноградова СО РАН.
e-mail: ainep@igc.irk.ru

Диоксид кремния самый распространенный оксид в земной коре. Природный диоксид кремния находит применение в качестве сырья в широком спектре продуктов. Наиболее высокие требования предъявляются к кварцевым концентратам для получения оптического кварцевого стекла, высокотемпературной керамике и изделиям для микроэлектроники. Известно более 10 полиморфных модификаций свободного диоксида кремния. Исследование полиморфных превращений природного диоксида кремния важно, как для понимания его природы, так и для разработки технологических процессов его обогащения. Фазовые переходы сопровождаются разрывом и преобразованием связей с существенным изменением кристаллической структуры. Особенно важным является изучение температуры и кинетики фазового перехода кварц - высокотемпературный кристобалит. Этот переход является, по-видимому, реконструктивным, имеет высокую энергию активации и протекают медленно. При этом происходит изменение удельного объема более чем на 12 %.

В работе исследовались наиболее перспективные типы кварцитов, выявленные на месторождении Бурал-Сардык, суперкварциты и мелкозернистые кварциты [1]. Проведены термические исследования, изучено влияние термодробления при температуре низкотемпературного α-кварц в высокотемпературный β-кварц. Было установлено, что вследствие изменения параметров кристаллической решетки, увеличения удельного объема происходит вскрытие газово-жидких включений и частичное высвобождение низкотемпературной и высокотемпературной воды. Дифференциально сканирующей калориметрией было установлено, что температура перехода низкотемпературного α-кварц в высокотемпературный β-кварц не зависит, как от чистоты материала, так и от структуры. При изучении полиморфного перехода кварц- кристобалит было установлено, что фазовый переход в кварцитах протекает медленно и кинетика перехода зависит от температуры и состава исходного материала [2].

[1] Воробьев Е.И. Спиридонов А.М., Непомнящих А.И., М.И. Кузьмин Сверхчистые кварциты Восточного Саяна (республика Бурятия, Россия) // Доклады Академии Наук. 2003. Т. 390. № 2. С. 219-223.

[2] А.П. Жабоедов, А.И. Непомнящих, Е.А. Середкин. Фазовые переходы в кварцитах месторождения Бурал-Сардык.// Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология, 2015, № 4, стр.57-62.

ПРЕДСКАЗАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР И ДИЗАЙН НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Оганов А.Р.

Сколковский Институт Науки и Технологий, Россия
Университет Штата Нью Йорк, Стони Брук, США
Московский Физико-Технический Институт, Россия
e-mail: a.oganov@skoltech.ru

До недавнего времени задача компьютерного предсказания материалов с нужными свойствами считалась нерешаемой. К счастью, ряд методов, позволяющих предсказать структуру материалов, а также методов, позволяющих по структуре предсказать свойства, приблизил нас к решению этой задачи. Я расскажу о двух наиболее популярных методах – (1) эволюционном методе USPEX (http://uspex-team.org) и (2) методах data mining. Будет рассказано об открытии неожиданных новых химических соединений, теоретических исследованиях наноматериалов, поиске сверхтвердых материалов, термоэлектриков, и о новом нами разработанном методе – Менделеевском поиске – который решает центральную задачу теоретического материаловедения, предсказание материала с наилучшими из возможных свойствами для заданного приложения.

К ВОПРОСУ О ФОРМИРОВАНИИ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОГО СЛОЯ: СТРУКТУРА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА МУЛЬТИСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА

Орехов А.С.[1,2], Клечковская В.В.[1], Петрова В.А.[3], Баклагина Ю.Г.[3], Кононова С.В.[3]

1 ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
2 НИЦ «Курчатовский институт»
3 ФГБУН Институт Высокомолекулярных Соединений РАН
e-mail: klechvv@ns.crys.ras.ru

Проблема конструирования и формирования композиционных полимерных пленок с управляемой наноструктурой связана с необходимостью развития новых подходов к созданию легко реализуемых воспроизводимых технологий получения мембран, высокоэффективных в диффузионных процессах разделения. Существуют результативные способы получения самоорганизующихся диффузионных слоев путем формирования интерполимерных комплексов на стадии пленкообразования. Тем не менее, отсутствует информация о структуре формируемых тонких слоев, а также о возможностях ее направленного изменения. Авторами предпринята попытка решения задачи изучения структурно-морфологических характеристик мультислойных композиционных пленок, содержащих наноразмерные слои полиэлектролитных комплексов на основе хитозана. Методами сканирующей электронной микроскопии в режиме низкого ускоряющего напряжения исследовались структурно-морфологические характеристики 1) поверхности структурированного слоя, образованного на межфазной границе в модельном композите поликатион хитозана/полианион, 2) поперечного сечения названных образцов. В работе использованы новые методики, специально разработанные для решения названной задачи.

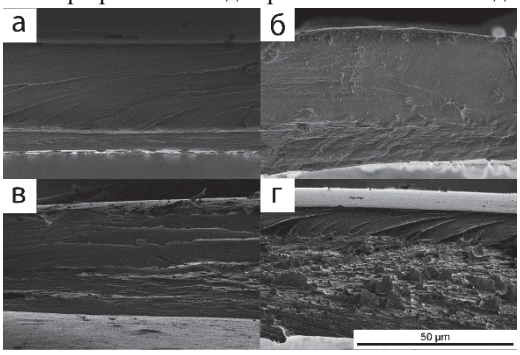


Рис. 1. СЭМ изображения поперечных срезов полислойных композитов на основе хитоза и других полисахаридов. .
При изучении структуры мультислойных композиционных полимерных пленок получена уникальная информация, позволяющая впервые визуализировать и исследовать структуру и морфологию на наноразмерном уровне разделительных слоев композиционных диффузионных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 16-19-10536

РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ: ОТ ПОРЯДКА К БЕСПОРЯДКУ

Островский Б.И.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Жидкие кристаллы (ЖК) – особое состояние вещества, промежуточное между трехмерным трансляционным порядком в кристаллах и полным ориентационным и позиционным беспорядком в жидкостях. В последние годы благодаря прецизионным рентгеновским экспериментам на современных синхротронах удалось существенно расширить наши представления о строении этих ЖК фаз. Нами рассмотрены особенности позиционного порядка в системах с одномерной (смектики) и двумерной (дискотики) периодичностью в трехмерных средах. Изучен порядок в ориентации связей в гексатических ЖК, и характеристики фазового перехода гексатик-смектик. Представлены результаты экспериментов с использованием как низкомолекулярных, так и в полимерных ЖК, в объеме, и в виде сверхтонких свободно подвешенных пленок. Рентгеновские эксперименты были выполнены на источниках синхротронного излучения PETRA III в DESY (Гамбург, Германия) и NSLS (Brookhaven, США). Важное внимание в докладе уделено анализу формы пиков рентгеновской дифракции, дающее ценные сведения о характере позиционных корреляций в системе, и существенно обогащающее информацию, получаемую в традиционном рентгеноструктурном анализе. Рассмотрены структура ЖК фаз, составленных из молекул с разнородными частями, свойства которых определяются стерической конкуренцией отдельных фрагментов. Эти эффекты, называемые геометрической фрустрацией, определяют локальную структуру среды и симметрию образующихся ЖК фаз. В качестве соответствующих примеров рассмотрена структура ЖК дендримеров, а также строение и поверхностная морфология монослоев частично фторированных алканов.

КИНЕТИКА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СОСТОЯНИЙ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НАНОСИСТЕМ. ВЛИЯЕИЕ ДЕФЕКТОВ И ОБЛУЧЕНИЯ

Петухов Б.В.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

Многочисленные исследования посвящены одномерным и квазиодномерным структурам, таким как нанопроволоки, молекулярные магнетики с цепочечной структурой, биологические макромолекулы и многие другие [1]. В настоящей работе изучается роль дефектов, как врожденных, так и наведенных облучением, в кинетике переключения состояний одномерных систем. Развивается аналитический подход к описанию влияния концевых эффектов, основанный на теории стохастического зарождения и коалесценции доменов новой фазы [2,3]. Применительно к магнитным системам метод позволяет рассчитывать кривые намагниченности и гистерезисные явления в зависимости от температуры и параметров материала.

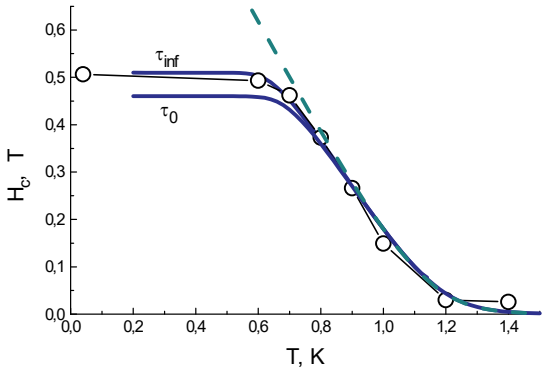


Рис. 1. Зависимость коэрцитивного поля H_c от температуры. Штриховая линия представляет неограниченную систему, сплошные кривые – варианты расчета для ансамбля сегментов случайных размеров. Кружки – экспериментальные данные [4] для цепочечного магнетика, образованного повторяющимся мотивом [-Mn^{III}-NC-Mn^{III}-CN-].

Как можно видеть из рисунка, коэрцитивное поле заметно убывает с повышением температуры. Однако в области низких температур имеет место ослабление температурной зависимости H_c. Подобную «атермичность» нередко приписывают эффектам квантового туннелирования [5]. Проведенный расчет показывает, что свой вклад в наблюдаемое поведение могут давать случайно расположенные дефекты, ограничивающие размеры сегментов системы.

[1] Wang Z.M. (Editor). // One-Dimensional Nanostructures. Springer, NY, 2008.

[2] Petukhov B.V. // JSTAT, 2013, P09019.

[3] Петухов Б.В. // ФТП, 2013, том 47, № 5, с. 613 (2013).

[4] Miyasaka H., Madanbashi T., Saitoh A., et al. // Chem. Eur. J. 2012, vol 18, no 13, p 3942-3954.

[5] Wernsdorfer W., Clérac R., Coulon C., et al. // Phys. Rev. Lett. 2005, vol 95, no 23, p 237203-1-4.

ОПИСАНИЕ ПСЕВДОСИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДАМИ МНОГОМЕРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Поплавной А.С.
Кемеровский государственный университет
e-mail: popl@kemsu.ru

Симметрия кристаллических соединений сложного химического состава со сложной структурой определяется не только их пространственной федоровской группой, но и внутренней, скрытой симметрией, которая может описываться на языке подрешеток [1]. Как показано в [1], для описания симметрии сложных кристаллов, составленных из K подрешеток, необходимо ввести 3K-мерное кристаллическое пространство, распадающееся на прямую сумму K трехмерных ортогональных подпространств. Развитая техника применена для изучения симметрии кристаллов, составленных из двух подрешеток Браве в кристаллических пространствах 6D [2], а также для описания анизотропных подрешеток в кубическом перовските в пространстве 9D [3].

Спектры элементарных возбуждений (электронные, фононные, экситонные и т.д.) определяются в многограннике Дирихле-Вороного (зоне Бриллюэна) обратного кристаллического пространства $3KD^*$ и имеют специфические особенности, обусловленные симметрией подрешеток. В случае если трансляционные подгруппы подрешеток шире трансляционной подгруппы кристаллической решетки, части зон Бриллюэна подрешеток, выходящие за пределы зоны Бриллюэна кристалла, транслируются в ее область. Эта процедура приводит к известному в физике твердого тела эффекту «свертывания» ветвей спектров элементарных возбуждений высокосимметричных структур; полезна и обратная процедура – развертывание ветвей спектров. В обоих случаях устанавливаются некоторые особенности спектров, обусловленные симметрией подрешеток. Следует заметить, что обе процедуры имеют смысл для тех ветвей спектров, которые преимущественно обусловлены квантовыми состояниями отдельных подрешеток.

[1] Поплавной А.С. // Кристаллография, 2007, Т. 52, № 4, с. 607-611.

[2] Поплавной А.С. // Кристаллография, 2010, Т. 55, № 2, с. 181-186.

[3] Поплавной А.С. // Кристаллография, 2016, Т. 61, № 2, с. 192-199.

МИКРОФЛЮИДНОЕ УСТРОЙСТВО ДЛЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БЕЛКОВ МЕТОДОМ МИКРОБАТЧ В КОСМОСЕ

Попов А.М., Николаева А.Ю., Мамичев Д.А., Занавескин М.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: Popov_AM@nrcki.ru

Основным методом определения структуры белковых молекул, является рентгеноструктурный анализ. Данные о структуре молекул белка необходимы для изучения их функциональных свойств, исследования молекулярных механизмов развития заболеваний, а также разработки эффективных лекарственных средств нового поколения. Точность определения структуры белка непосредственно связано с возможностью синтезировать низкодефектные кристаллы большого размера. Один из путей решения - это их выращивание кристаллов белка в условиях невесомости, т.е. в космосе.

Возможность использования оборудования для кристаллизации в космосе накладывает ограничение на его массогабаритные характеристики. Одно из возможных решений – использование технологии кристаллизации в микрофлюидных каналах. В основе разрабатываемого микрофлюидного устройства для кристаллизации белков лежит идея о формировании большого числа изолированных между собой капель-микрореакторов, в которых создаются различные условия для кристаллизации. Такой подход позволяет проводить скрининг условий кристаллизации в микроканалах с малым расходом реагентов.

Микрофлюидный чип для кристаллизации белка изготавливался из полиметилметакрилата (ПММА) методом лазерной абляции. Выбранный подход позволяет снизить себестоимость изготовления микрофлюидных чипов и время разработки новых дизайнов. В изготовленном микрофлюидном чипе каналы имели параболический профиль с размерами 200х200 мкм. С помощью системы шприцевых насосов в чипе были сформированы капли-микрореакторы, объемом порядка 5 – 10 нанолитров. При этом топология чипа позволяла получать более 50 экспериментальных микрореакторов. В результате апробации устройства были получены кристаллы лизоцима с характерными размерами 50 – 120 мкм.

В итоге, этот компактный микрофлюидный чип, является альтернативой кристаллизационным устройствам основанных на методе обратной диффузии и современным роботизированным автоматическим кристаллизаторам (диффузионные методы), массогабаритные характеристики и принцип работы которых не позволяют использовать их на орбите.

РОСТ И СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК П-КВАТЕРФЕНИЛА И ЕГО НОВЫХ ПРОВЗОДНЫХ

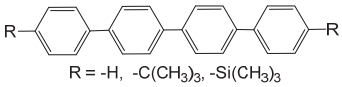
Постников В.А.[1], Сорокина Н.И.[1], Алексеева О.А.[1], Гребенев В.В.[1], Лясникова М.С.[1], Шаухин М.К.[2], Борщев О.В.[2], Пономаренко С.А.[2], Волошин А.Э.[1]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

[2]*ИСПМ РАН, Москва, Россия*

postva@yandex.ru

Большой интерес для органической оптоэлектроники представляют олигофенилы, известные как высокостабильные и хорошо излучающие в синей области спектра люминофоры. В работе представлены результаты исследования роста из раствора и структуры монокристаллических плёнок п-кватерфенила (4P) и его новых производных с концевыми заместителями «-C(CH$_3$)$_3$» (tertBu-4P-tertBu) и «-Si(CH$_3$)$_3$» (TMS-4P-TMS):



Рост кристаллических плёнок осуществлялся на межфазной границе жидкость - воздух методом медленной диффузии в раствор осадителя из паровой фазы [1]. Наличие в структуре молекулы 4P концевых заместителей существенно улучшает растворимость олигомера и повышает межфазную активность, за счет чего увеличивается скорость роста и размеры монокристаллических плёнок, примеры которых представлены на рис.1.

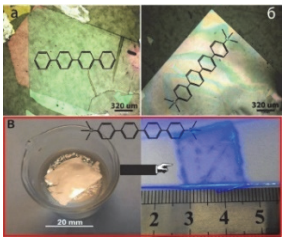


Рис.1. Микроизображения кристаллических плёнок 4P (а), tertBu-4P-tertBu (б) и макроизображение плёнки TMS-4P-TMS на поверхности раствора и извлеченной на стеклянную подложку под УФ освещением (в).

Кристаллические плёнки подробно изучены методами оптической, конфокальной и атомно-силовой микроскопией. Методом монокристального рентгеноструктурного анализа при 85K и 295K для tertBu-4P-tertBu и TMS-4P-TMS впервые расшифрована, а для 4P уточнена кристаллическая структура. Рост тонких плёнок по ширине вдоль границы жидкость – воздух осуществляется в кристаллографической плоскости (001), а по толщине (нормально границе раздела фаз) происходит послойно. В результате ex situ исследований поверхности подложек после медленного испарения капель раствора методом конфокальной микроскопии получен массив данных, выявляющих закономерности формирования кристаллических тонких плёнок на ранних стадиях.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-02-00931-а

[1] V.A. Postnikov et. al.//*Cryst. Growth Des*. 2014, 14, 1726−1737

СТРУКТУРНАЯ МИНЕРАЛОГИЯ СИЛИКАТОВ: НОВЫЕ ОТКРЫТИЯ И ИДЕИ

Пущаровский Д.Ю., Зубкова Н.В., Пеков И.В.

Московский государственный университет имениМ.В.Ломоносова, Геологический ф-т

e-mail: dmitp@geol.msu.ru

Наиболее полная версия базы структурных данных ISCD в начале 2016 года содержала структурные характеристики 9 000 природных и синтетических силикатов. Число геометрически различных комплексов из Si-тетраэдров к концу XX века превысло 100. Разнообразие Si,O-комплексов относится к минералам земной коры, в которой силикаты составляют 96.5% всего объема. Однако это – лишь 0.6% от общего содержания силикатов в объеме Земли. Таким образом основная часть силикатов сосредоточена в глубинных геосферах. По последним данным силикаты доминируют и на Марсе.

Рассмотрены новые островные комплексы, одномерная тетраэдрическая лента, недавно открытые новые одинарные кремнекислородные слои и многослойные (сдвоенные, 3-х слойные, объемные 4-х слойные) тетраэдрические пакеты. Ажурный тетраэдрический пакет гюнтерблассита служит «мостом» между слоистыми и каркасными Si,O-анионами. В минералогической классификации силикаты с разнородными тетраэдрическими комплексами относительно редки и на начало 2016г. их число не превышало 80-ти. Вклад в структурную химию этой группы связан с исследованием чароита, шафрановскита и менделеевита-Ce. Новые инструментальные возможностя и прогресс в програмном обеспечении расширили научные представления о структурной химии силикатов, дополнив ряд разделов минералогии, материаловедения и неорганической химии. Большая часть материи во Вселенной находится в условиях высоких давлений. Результаты расчетов указывают на возможность образования при давлении ~1ТПа двух новых силикатных фаз Mg_2SiO_4 и $Mg_2Si_2O_5$ с атомами Si в 8-ной, а также в 8- и 9-ной координации соответственно. Таким образом изучение структур силикатов способствует пониманию строения и минерального состава гигантских экзопланет. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 14-17-00048.

ГРУППЫ НЕКЛАССИЧЕСКИХ ПОДСТАНОВОК ДЛЯ СТРУКТУР С НАРУШЕННОЙ СИММЕТРИЕЙ В КОМПЬЮТЕРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Рау В.Г.[1], Рау Т.Ф. [2], Ломтев Л.А. [1], Никитин О.Р. [2]

[1] *Владимирский Филиал Российской Академии Народного хозяйства и Государственной службы при Президенте РФ*

[2] *Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых*

e-mail: vgrau@mail.ru

В работе [1] был предложен компьютерный способ «визуализации» абстрактных групп симметрии кватернионов, матриц Паули, матриц Дирака и локальной симметрии кристаллов в периодическом упаковочном пространстве решетки.

С целью расширения возможностей компьютерного эксперимента, нами были исследованы таблицы Кэли абстрактных и реальных непериодических структур с «масштабной инвариантностью», разработана их компьютерная визуализация. При описании молекулярной структуры с внутрикомплексными водородными связями, нарушающими классическую симметрию октаэдрического катиона $[Me(urea)_6]^{+2,+3}$ [2], в компьютерные расчеты понадобилось ввести простой дефект («ошибку») в кодировку элемента подгруппы подстановок. Производя затем операции умножения «неклассических подстановок», была получена совершенно новая форма таблиц конечного подмножества произведений бинарных операций, не совпадающая со свойствами таблиц Кэли. В частности, в одном из модельных компьютерных экспериментов, в числовом множестве из 34 точек удалось выделить 4 операции (включая тождественное преобразование g[0]), которые образуют замкнутое циклическое подмножество преобразований (табл. 1), с образующим элементом g[1]: $g[1]^2= g[2]$, $g[1]^3= g[3]$.

Таблица умножения конечного подмножества бинарных операций из 4-х преобразований

Табл. 1.

g[0]=(0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33); .g[0] g[1] g[2] g[3]

g[1]=(10 14 18 21 25 27 29 21 25 4 31 4 31 6 16 6 16 8 16 8 10 18 10 18 12 16 12 14 14 16 23 16 23 28); g[1] g[2] g[3] g[3]

g[2]=(31 16 16 18 16 14 16 18 16 25 16 25 16 29 16 29 16 25 16 25 31 16 31 16 31 16 31 16 16 16 18 16 18 14); g[2] g[3] g[3] g[3]

g[3]=(16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16); g[3] g[3] g[3] g[3]

Визуализация структур операций этого подмножества изображена на рис. 1.

Очевидно, что структуры операций (рис.1) представляют собой орграфы с конвергентными свойствами (пути, сходящиеся к точке). Легко проверить, что для любой таблицы умножения (с любым конечным количеством элементов), структурно построенной по аналогии с табл. 1, обязательно существует одно преобразование, которое можно записать единственным значением числа R (табл.2). В структуре орграфа такую точку, к которой сходятся все пути (так же, как на рис. 1 для g[3], R=16) назовем, сокращенно, «Рим» (по старинной поговорке: «все дороги ведут в Рим»), а множество элементов такой таблицы и структуру, в которой обязательно существует «римская» точка, «римским множеством».

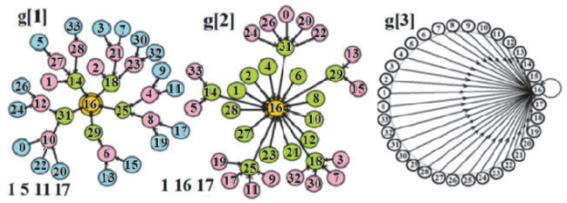


Рис. 1. Визуализация структур элементарных преобразований g[1] - g[3] из таблицы 1. Для g[1] и g[2] выделена числовая последовательность как «по слоям», так и с помощью различной окраски

Таблица умножения преобразований с римской точкой на множестве из 8 точек Табл. 2

g[0]=(0 1 2 3 4 5 6 7); g[0]g[1]g[2]g[3]g[4]g[5]g[6]g[7] g[4]=(4 5 6 7 7 7 7 7); g[4]g[5]g[6]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]

g[1]=(1 2 3 4 5 6 7 7); g[1]g[2]g[3]g[4]g[5]g[6]g[7]g[7] g[5]=(5 6 7 7 7 7 7 7); g[5]g[6]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]

g[2]=(2 3 4 5 6 7 7 7); g[2]g[3]g[4]g[5]g[6]g[7]g[7]g[7] g[6]=(6 7 7 7 7 7 7 7); g[6]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]

g[3]=(3 4 5 6 7 7 7 7); g[3]g[4]g[5]g[6]g[7]g[7]g[7]g[7] g[7]=(7 7 7 7 7 7 7 7); g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7]g[7] РИМ

Операция g[7], в римском множестве таблицы 2 выполняет функцию «нуля», так как ее применение к другим операциям множества, оставляет g[7] в качестве результата: «нуль, на что не умножай, остается нулем». В итоге, римское множество бинарных операций имеет «единицу» (g[0], без симметрии, когда все точки различимы) и «нуль» (g[7], с абсолютной симметрией, когда все точки неразличимы), но не имеет обратных элементов. К дивергентным свойствам расходимости орграфа можно перейти заменой верхних строк в матрицах на нижние, и тогда, можно описывать послойный рост нанокластеров и кристаллических зародышей [3]. Подобные «леса» из деревьев орграфа часто встречаются в микробиологии при описании этапов микроэволюции. Предлагаемая методика еще раз показывает, каким образом, давно обнаруженное в кристаллографии Пьером Кюри *нарушение симметрии, «творит новое явление»*.

[1]. Valery G. Rau *, Leonty A. Lomtev and Tamara F. Rau // Symmetry (USA), 2013, 5, 54-80: doi:10.3390/sym5010054.

[2]. Rau V.G., Rau T.F., и др. // Kristallografiya (Russ.) (Crystallogr.Rep.), 2000, 45, С.653-657.

[3]. Рау В.Г., Скворцов К.В. и др.//Журнал «Структурная химия», Новосибирск, СО РАН, 2011,том 52, №4, С.781-786.

ПОЛИТИПИЯ И РАЗУПОРЯДОЧЕННОСТЬ В СТРУКТУРЕ ЧАРОИТА $(K,SR,BA,MN)_{15-16}(CA,NA)_{32}[(SI_{70}(O,OH)_{180})](OH,F)_{4.0} * NH_2O$ И ДЕНИСОВИТА $K_{14}CA_{42}NA_6[SI_{60}(O,OH)_{162}]F_{16}(O,OH)_8*2H_2O$

Рождественская И.В.[1], Маньоли Э.[2], Цанк М.[3], Депмайер В.[3]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет*
[2] *Университет г. Сиенна, Италия*
[3]*Университет им.ХристианаАльбрехта г. Киль, Германия*
e-mail: ivrozhdestvenska@mail.ru

Денисовит и чароит представляют собой тонковолокнистые минералы с диаметром волокна 50-200 нм.

Структура этих минералов исследована современными методами электронной микроскопии (ЭМ): высокоуглового темнопольного сканирования (HAADF-STEM), трансмиссионной ЭМ высокого разрешения (HRTEM), прецессионной электронной дифракции (PED) и электронной дифракционной томографии (EDT).

Структуры денисовита и чароита (Рис.) можно представить как состоящие из бесконечных кремнекислородных радикалов: трубчатого$[Si_{12}O_{30}]^{12-}$, изогнутых кремнекислородных лент $[Si_6O_{17}]^{10-}$, а также в структуре чароита –трубчатого радикала $[Si_{18}O_{45}]^{18-}$. Радикалы располагаются между колонками реберно-поделенных $[(Ca,Na)O_6]$ октаэдров. Радикалы и колонки октаэдров вытянуты вдоль оси *z*.

Кремнекислородные радикалы образуют модули, которые могут сдвигаться относительно октаэдрических колонок на ½*c* как жесткий блок, что соответствует ошибкам наложения вдоль оси *x* с вектором ошибки ½[001]. Это является предпосылкой появления политипии. Наложение модулей вдоль оси *x* без сдвига приводит к одному политипу (чароит-90, денисовит-*a*), регулярный сдвиг каждого модуля в одном направлении приводит к другому политипу (чароит-96, денисовит-*n*), неупорядоченное чередование сдвигов в + и – направлениях приводит к разупорядоченной структуре.

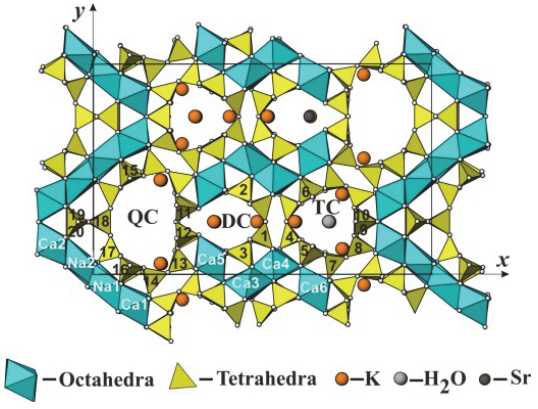


Рис. Структура чароита в проекции на плоскость xy.

Работа поддержана внутренним грантом СПбГУ (3.38.243.2015).

[1] Rozhdestvenskaya, I., Mugnaioli, E., etc. Mineralogical Magazine, 2010, V. 74, p. 159-177.

[2] Rozhdestvenskaya, I., Mugnaioli, E.,etc. Mineralogical Magazine, 2011, V. 75, p. 2833-2846.

ДВУМЕРНЫЙ ЛОКАЛЬНО-ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОРЯДОК НА ПОВЕРХНОСТЯХ СО СФЕРИЧЕСКОЙ ТОПОЛОГИЕЙ

Рошаль Д.С., Мясникова А.Э.
Южный федеральный университет
e-mail: rochal.d@yandex.ru

Множество физических и биологических объектов состоят из структурных единиц, образующих двумерные кристаллы с локальным гексагональным порядком. К наиболее упорядоченным таким структурам относятся капсиды вирусов, фуллерены, нанотрубки. К наиболее дефектным системам относятся сферические коллоидные кристаллы (СКК).

Математически моделируется самосборка 2D кристаллов со сферической топологией [1-4]. Частицы удерживаются на искривленной поверхности и взаимодействуют отталкивающим потенциалом. Координаты частиц находятся минимизацией энергии методом градиентного спуска. Рассмотрено образование различных дефектов на поверхности СКК, а также реакции между различными дефектами. Проведен поиск наиболее низкоэнергетических упаковок частиц на поверхности сферы (проблема Томсона) [3].

Предложен физический механизм уменьшения степени дефектности двумерных СКК. Совершенствование структуры осуществляется за счет последовательных циклов имплантации частиц [4] и последующей релаксации кристалла. Механизм потенциально пригоден для получения коллоидосом [1] с близкими размерами пор, что может улучшить селективность проницаемости наноконтейнеров данного типа. Развитый подход также позволяет моделировать конические и трубчатые двумерные нанокристаллы с минимальным количеством топологических дефектов, в том числе различные возможные полиморфные формы капсида ВИЧ (см. рис. 1).

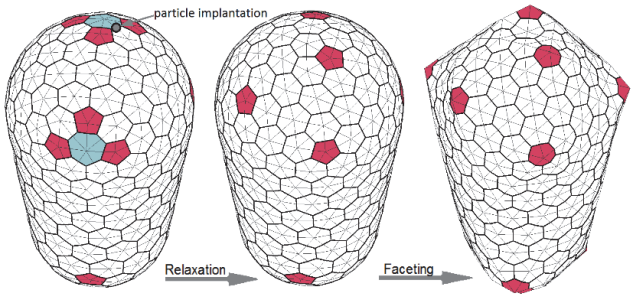


Рис.1. Моделирование капсида ВИЧ.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант №15-12-10004).

[1] Рошаль Д.С. // ФТТ, 2013, Т 55, с.2012.

[2] Roshal D.S., Petrov K.Yu., Myasnikova A.E., Rochal S.B. // Phys. Lett. A., 2014, V. 378, P.1548.

[3] Roshal D.S., Myasnikova A.E., Rochal S.B. // Phys. Lett. A., 2015, V. 379, P.372.

[4] Roshal D.S., Myasnikova A.E., Rochal S.B. // Physica E., 2016, V. 75, P.295.

СТРУКТУРНАЯ ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ СВОЙСТВ СУПЕРПРОТОНИКОВ $(K_{1-x}(NH_4)_x)_mH_n(SO_4)_{(m+n)/2}\cdot yH_2O$

Селезнева Е.В., Макарова И.П., Гребенев В.В., Коморников В.А.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: msdmitricheva@yandex.ru

Проведено изучение системы $K_3H(SO_4)_2$–$(NH_4)_3H(SO_4)_2$–H_2O и выращенных кристаллов $(K_{1-x}(NH_4)_x)_mH_n(SO_4)_{(m+n)/2}\cdot yH_2O$. Установлено, что в зависимости от состава исходного раствора кристаллы имеют различный габитус и структурный тип [1]. Использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением 9:1 – 7:3 приводит к росту кристаллов со структурным типом, как у $K_3H(SO_4)_2$ [2]. По данным РСА в состав образцов входит не менее 3% аммония, и этого количества достаточно для существенного изменения кинетики суперпротонного ФП в сравнении с кристаллами $K_3H(SO_4)$.

Использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением близким к 1:1 приводит к росту монокристаллов со структурным типом, отличающимся от исходных соединений [1, 3]. Структурный переход в этих кристаллах связан с выходом кристаллизационной воды, перестройкой системы водородных связей в частично динамически разупорядоченную с дополнительными позициями для протонов, что обуславливает появление высокой проводимости.

Использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением 3:7 – 1:9 приводит к росту монокристаллов с таким же структурным типом, как у высокотемпературной суперпротонной фазы $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ [4]. Величина проводимости выращенных кристаллов уже при комнатной температуре соответствует проводимости исходных соединений при повышенных температурах. Установлено, что в состав образцов $(K_{1-x}(NH_4)_x)_3H(SO_4)_2$ входит ≈ 57% аммония.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ № СП-1445.2016.1.

[1] Дмитричева Е.В. и др. // Кристаллография, 2014, том 59, № 3, с 387.

[2] Дмитричева Е.В. и др. // Кристаллография, 2014, том 59, №6, с. 966.

[3] Dmitricheva E.V. et al. // Solid State Ionics, 2014, V. 268, p. 68.

[4] Дмитричева Е.В. и др. // Кристаллография, 2015, том 60, №6, с. 880.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГЕКСА- И ДОДЕКАБОРИДОВ f- И d-ЭЛЕМЕНТОВ

Серебренников Д.А.[1], Клементьев Е.С.[1,2], Алексеев П.А.[3,4]

[1] НОЦ «Фукнциональные наноматериалы», БФУ им Канта

[2] ИЯИ РАН

[3] НИЦ «Курчатовский Институт»

[4] НИЯУ МИФИ

e-mail: dserebrennikov@innopark.kantiana.ru

Бориды редкоземельных элементов представляют значительный интерес для фундаментальной физики и приложений ввиду многообразия аномальных физических свойств. Особенностью структуры данных соединений является склонность к формированию жесткого каркаса и всевозможных кластеров. Сильно связанный борный каркас придает материалам повышенную твердость и устойчивость к внешним механическим и температурным воздействиям. В свою очередь, редкоземельные атомы играют ключевую роль в формировании электронных, магнитных и термодинамических свойств материала, некоторые из которых зачастую оказываются аномальными [1].

В данной работе исследуются динамика решетки, а также термодинамические свойства гекса и додекаборидов f и d-элементов. Рассматриваются особенности дисперсии фононов данных систем. Разработан новый подход для моделирования акустических и низкоэнергетических оптических фононов, формирующих термодинамические свойства материала в области низких температур [2]. Исследуются границы применимости предложенной модели. На основе данной модели проанализированы аномалии динамики решетки гексаборидов тяжелых f-элементов. С целью оценки аномального электронного вклада в коэффициент теплового расширения валентно-нестабильных боридов впервые применена двухуровневая модель Вейсса.

[1] Алексеев П.А. // УФН, 2015, том 185, №4, с 353-370.

[2] Серебренников Д.А., Клементьев Е.С., Алексеев П.А. // ЖЭТФ, 2016, том 150, №3(9), с 526-535.

НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОВОДНИКИ: СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Симонов С.В., Зорина Л.В., Хасанов С.С., Шибаева Р.П.
Институт физики твердого тела РАН, г.Черноголовка
e-mail: simonov@issp.ac.ru

Доклад посвящен обобщению результатов систематического исследования большого количества синтетических органических проводников, которое проводится в течение ряда лет в Черноголовском научном центре.

Низкоразмерные молекулярные проводники на основе ион-радикальных солей уникальны по структурному строению, проявляют полиморфизм, фазовые переходы, сверхструктурные модуляции и другие особенности. Анизотропия межмолекулярных взаимодействий обуславливает сильно анизотропную электронную проводимость в слоях или стопках органических радикалов. Наличие различных по свойствам компонент в одной кристаллической решетке позволяет создавать полифункциональные кристаллы, сочетающие проводимость с магнитными и фотохромными свойствами. Богатое разнообразие структурных типов и доступность управления анизотропией с помощью внешнего воздействия (давление, температура) сделали их основными объектами по изучению электронных транспортных свойств низкоразмерных систем. По характеру кристаллической структуры и ряду свойств слоистые органические сверхпроводники близки к высокотемпературным металлооксидным сверхпроводникам и рассматриваются как важные модельные объекты для изучения механизма высокотемпературной сверхпроводимости.

В докладе будут представлены результаты рентгеноструктурного анализа кристаллов молекулярных проводников и показана корреляция структуры со свойствами кристаллов. Будут продемонстрированы примеры зарядового упорядочения в проводящих слоях; влияния растворителя, входящего в непроводящий слой, на транспортные свойства; несоразмерные структурные модуляции, возникающие вследствие несовпадения периодичности проводящих и непроводящих слоев в кристалле.

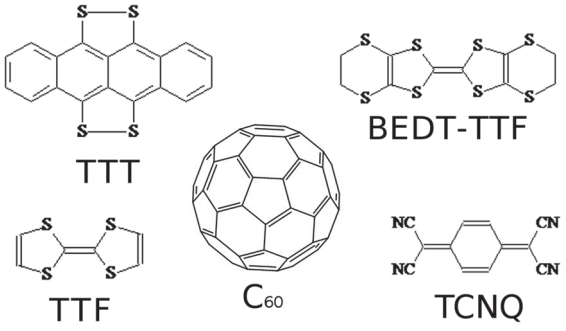


Рис. Молекулы – основа низкоразмерных проводников

О ЗАПРЕЩЕННЫХ ПОЗИЦИЯХ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Сомов Н.В., Чупрунов Е.В.
ННГУ им. Н.И. Лобачевского
e-mail: somov@phys.unn.ru

Взаимное расположение атомов в кристаллическом пространстве, как известно, отвечает минимуму потенциальной энергии взаимодействия всех атомов кристаллической структуры. Принцип минимума потенциальной энергии может быть реализован в ряде геометрических способов приближенного описания расположения атомов в кристаллах. В частности, такими способами являются принцип плотнейшей упаковки для кристаллов неорганических соединений с ненаправленными связями и принцип наиболее плотной упаковки молекул для молекулярных кристаллов.

Если рассматривать атомы как геометрические объекты, имеющие конечный объем, сопоставимый с объемом элементарной ячейки кристалла, то это приводит к геометрическим ограничениям на взаимные расположения атомов в кристаллическом пространстве. Эти ограничения обусловлены тем, что расстояние между двумя атомами не может быть меньше суммы их кристаллохимических радиусов.

Для каждой федоровской группы симметрии характерны свои ограничения на расположение атомов в кристаллическом пространстве, которые определяются набором элементов симметрии пространственной группы, а также размерами элементарной ячейки. Это означает, что некоторые ПСТ таких групп не могут реализовываться в природе вследствие чисто геометрических причин. Множество таких точек образуют запрещенные области в элементарной ячейке кристалла. В зависимости от суперпозиции элементов симметрии запрещенные области могут иметь разную форму и размерность.

В рамках данной работы для всех 230 групп пространственной симметрии был исследован объем запрещенных областей, определена пространственная симметрия запрещенных областей. Построена классификация пространственных групп симметрии в зависимости от симметрии запрещенных областей.

ТЕМПЕРАТУРНО-УПРАВЛЯЕМЫЙ МЕТОД КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БЕЛКОВ В УСЛОВИЯХ МИКРОГРАВИТАЦИИ

Стрелов В.И.[1], Захаров Б.Г.[1], Безбах И.Ж.[1], Сафронов В.В.[1], Чернышев Б.В.[2], Дутышев И.Н.[2]

[1]Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] ФГУП СКБ ИРЭ РАН

e-mail: kmikran@spark-mail.ru

При кристаллизации белков одним из важных факторов, определяющих качество кристаллов, являются условия транспорта вещества к растущему кристаллу, который осуществляется конвекционными потоками и диффузией. Поэтому исключение термогравитационной и конвекции Марангони (создание диффузионного массопереноса) в условиях микрогравитации обеспечивает наиболее благоприятные условия для получения высокосовершенных кристаллов.

Для выращивания в условиях микрогравитации на борту АКА «Фотон-4М» кристаллов белков разработана и изготовлена ростовая установка, обеспечивающая рост кристаллов белков в 6 капиллярах. Реализованный метод температурно-управляемой кристаллизации с прецизионной ±(0,1–0,2)°С стабилизацией температуры и управлением ею в ходе процесса кристаллизации обеспечивает оперативное раздельное управление процессом роста кристаллов как на этапе их зародышеобразования, так и в процессе роста образовавшихся кристаллов. При этом использование тонких рентгеновских капилляров исключает возможность повреждения кристаллов при проведении дифракционных исследований. Научная аппаратура обеспечивает полностью автоматическое проведение экспериментов на борту космических аппаратов с использованием бортового компьютера.

В результате рентгеновских исследований выращенных кристаллов установлено, что во всех капиллярах получены кристаллы высокого качества с дифракционным разрешением не хуже 1,54 Å. Результаты космического эксперимента продемонстрировали надежную работу разработанной научной аппаратуры и большие возможности температурно-управляемого метода кристаллизации для выращивания высокосовершенных кристаллов белков, в том числе и в условиях микрогравитации

ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ГЕНЕРАТОРЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

Стрелов В.И., Баскаков Е.Б., Бендрышев Ю.Н., Косушкин В.Г.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

E-mail:strelovvi@kaluga.ru

Работа известных в настоящее время теплоэлектрогенераторов (ТЭГ) основана на эффекте Зеебека, принцип действия которого заключается в возникновении электродвижущей силы (ЭДС) в замкнутой электрической цепи, состоящей из последовательно соединенных разнородных проводников, контакты между которыми необходимо постоянно поддерживать при различных температурах. Существенным ограничением преимуществ термоэлектрического преобразования на основе эффекта Зеебека остаётся относительно низкий коэффициент эффективности преобразования теплового потока в электрическую энергию – КПД = (9 – 14)% и необходимость создания градиента температуры. В настоящее время появилась возможность создания высокоэффективного термопреобразователя на основе сульфида самария (SmS), проявляющего эффект возникновения термоЭДС без создания разности температур, что позволит разработать на его основе перспективный и эффективный промышленный образец теплоэлектрогенератора с КПД до 30% (и более).

В процессе предварительных исследований экспериментально установлено, что значение термоЭДС для образца SmS размерами 1,5×1,5 мм составляет 37 мВ при силе тока до 24 мА. По результатам проведенного эксперимента эффект наблюдался при равномерном нагреве образца в диапазоне температур от 75 до 600 °С без создания градиента температуры. При этом экспериментально установлено, что уменьшение размеров образца SmS приводит не к снижению, а к увеличению значения термоЭДС, что является важным с точки создания эффективных теплоэлектрогенераторов на основе моносульфида самария (SmS) с использованием стандартной планарной технологии микроэлектроники. К настоящему времени разработаны эскизные конструкции тонкоплёночных ТЭГ.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПРЕЦИПИТАЦИЯ ПРИМЕСЕЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ВЛАСОВА ДЛЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Таланин В.И., Таланин И.Е.
Институт экономики и информационных технологий, Запорожье, Украина
e-mail: v.i.talanin@mail.ru

Для описания физических свойств твердых тел с точки зрения их атомного строения существует два подхода. Классический подход постулирует понятие кристаллической решетки, и его применение привело к созданию классической теории зарождения и роста частиц второй фазы в твердых телах [1].

В рамках второго подхода периодическая структура кристаллов обусловлена специфичностью статистических законов движения частиц, согласовывающих периодическую структуру со свободой перемещения атомов, в результате чего вероятность встретить атом в межузлиях всегда отлична от нуля. Второй подход основывается на решении кинетического уравнения Власова. Решение для твердого тела показало, что пространственное периодическое распределение есть одно из частных состояний движения частицы [2]. Решение было проведено для идеального (бездефектного) кристалла, а для описания реальной структуры кристалла модель Власова для твердого тела до настоящего времени не использовалась.

В данной работе рассмотрено применение модели Власова для описания зарождения дефектной структуры с учетом реальных тепловых условий роста кристалла. Показано, что классическая теория зарождения и роста частиц второй фазы и модель Власова для твердого тела идентично рассматривают образование и эволюцию частиц второй фазы во время охлаждения кристалла после выращивания. Например, в соответствии с моделью Власова для твердого тела процесс образования комплекса «примесь-собственный точечный дефект» начинается вблизи фронта кристаллизации, а изменение температурных условий роста кристалла приводит к изменению времени стадии зародышеобразования.

С помощью модели Власова выявлено, что при термических обработках кристаллов комплексообразование маловероятно. Комплексообразование в кремнии при термических обработках возможно только при высоких температурах (более 1600 К). Две теории зародышеобразования частиц второй фазы, которые базируются на различных гносеологических подходах приводят к идентичным результатам. Оба подхода описывают процессы высокотемпературной преципитации примеси, которая является основой процесса дефектообразования в кристаллах. Предложен метод расчета исходной дефектной структуры кристаллов, который включает в себя модель Власова для твердых тел и классическую теорию зарождения и роста частиц второй фазы в твердых телах.

[1] Таланин В.И., Таланин И.Е. // Физика твердого тела, 2016, том 58, №3, с. 417-427.

[2] Vlasov A.A. // Journal of Physics, 1945, vol. 9, p. 130-138.

РОСТ КРИСТАЛЛА ПОСРЕДСТВОМ НЕАВТОНОМНОЙ ФАЗЫ: СЛЕДСТВИЯ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ В РУДНЫХ СИСТЕМАХ

Таусон В.Л.[1], Липко С.В.[1], Арсентьев К.Ю.[2], Смагунов Н.В.[1]
[1]*ФГБУН Институт геохимии им. А.П.Виноградова СО РАН*
[2]*ФГБУН Лимнологический институт СО РАН*
e-mail: vltauson@igc.irk.ru

Рост кристаллов в сложных многофазных ассоциациях, моделирующих природные минеральные парагенезисы, слабо изучен. Такие системы обычно не используют как среды для выращивания кристаллов ввиду наличия загрязнений, “отравления” ростовой поверхности и усложнения ростовых процессов. Гидротермальные ростовые эксперименты в сульфидных и оксидных системах показали, что поверхности минералов химически модифицированы вследствие их взаимодействия с ростовой средой и содержат малоразмерные неавтономные фазы (НФ) необычного химического состава. НФ способны регулировать взаимоотношения кристалла и среды, избирательно взаимодействуя с переносящими вещество комплексами и снижая вероятность их “неправильной” разгрузки. Поглощая несовместимые элементы, они действуют как фильтры для примесей, отравляющих ростовую поверхность. Это приводит к универсальной высоко детерминированной зависимости содержания таких элементов от размера или удельной поверхности среднего кристалла в размерной выборке. Для золота в пирите это явление продемонстрировано на большом числе месторождений разного типа [1]. Платина ведет себя подобным образом (рис.1). При 500°С и давлении 100 МПа в пирит входит до ~ 11 ppm Pt, тогда как в поверхностно-связанной форме, в составе НФ, содержание элемента значительно выше.

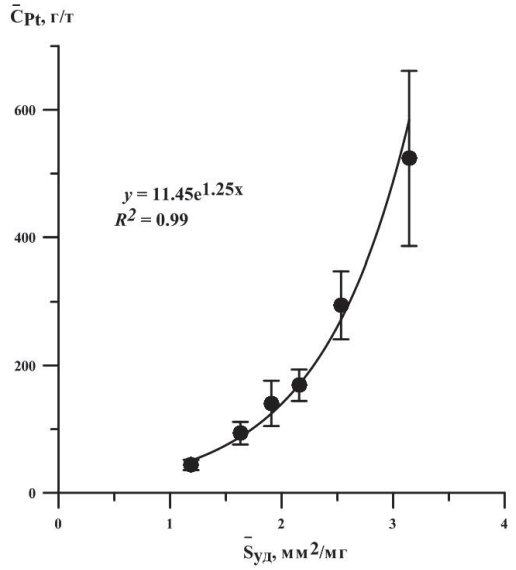


Рис.1. Распределение Pt по кристаллам пирита с разной удельной поверхностью.

Обнаруженный новый механизм концентрирования микроэлементов в условиях эндогенного рудообразования путем их вхождения в состав поверхностных НФ важен для правильной интерпретации геохимических параметров,

таких как коэффициенты распределения и сокристаллизации элементов, а также в плане оценки “истинной” металлоносности и выработки рациональной технологии переработки рудного сырья.

Работа поддерживается грантами РФФИ №№ 16-35-00102, 15-05-05767, 15-05-00612, 16-05-00104. Используется оборудование ЦКП “Изотопно-геохимические исследования” ИГХ СО РАН и “Ультрамикроанализ” ЛИН СО РАН.

[1] Таусон В.Л., Кравцова Р.Г., Смагунов Н.В. и др. // Геология и геофизика, 2014, том 55, № 2, с. 350-369.

РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ-СЛУЧАЙНОСТЬ ИЛИ НЕОБХОДИМОСТЬ?

Тафеенко В.А.

Химический факультет, МГУ им.М.В.Ломоносова

e-mail: Tafeenko-victor@yandex.ru

Принято, что порядок – атрибут кристалла, отсутствие порядка - характеристика аморфного состояния вещества. В то же время, согласно Кембриджской базе структурных данных, более 20% молекулярных кристаллов содержат в своем строении разупорядоченные молекулы или фрагменты молекул.

В работе “Беспорядок ради Порядка” [1], впервые, беспорядок для кристаллов, которым присуще разупорядочение молекулы или ее фрагмента, определен как необходимая для образования и существования молекулярного кристалла характеристика. На основании исследования кристаллической и молекулярной структуры органической соли, построенной из N,N диметиланилиниум (DMA+) катиона и 3-циано-4-дицианметилен-5-оксо-4,5-дигидро-1Н-пиррол-2-олат аниона (HA−), сделан вывод, что в молекулярных кристаллах степень беспорядка для данной фазы (полиморфной модификации) величина постоянная, не зависящая от условий получения, и может быть изменена лишь с изменением фазы, (полиморфной модификации) исследуемой молекулы.

Изменения ориентации молекулы в кристалле меняет воздействие на нее окружающих молекул и, следовательно, ведет к изменению присущих молекуле свойств. Данное утверждение продемонстрировано на примере зависимости люминесцентных характеристик исследуемого вещества (DMA^+)(HA^-) от разупорядочения (DMA^+) катиона.

Разупорядочение в кристаллах – это характеристика кристалла на основе которой возможно создания технологически востребованных материалов.

[1] Tafeenko V.A., Gurskiy S.I. //Disorder for the Sake of Order, Crystal Growth&Design, 2016, 16, 940 - 945.

ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ЧАСТИЦ ДЕНДРИМЕРОВ

Фейгин Л.А.[1,2], Штыкова Э.В.[1,3]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Московский государственный университет

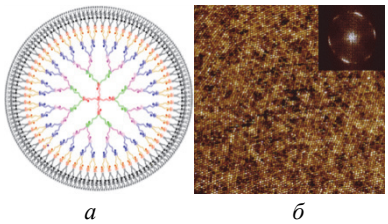
e-mail: feigin@ns.crys.ras.ru

Способность к кристаллизации органических макромолекул в общем случае и частиц карбосилановых дендримеров в частности определяется химической и геометрической структурой макромолекул и закономерностями их межмолекулярных взаимодействий. Последние зависят не только от состава среды, но также и от природы периферийных групп. *Молекулярная* архитектура дендримеров характеризуется наличием множественных реактивных сайтов на концах ветвей и их способностью присоединять различные химические соединения. Возможность направленной модификации периферийных групп и их высокая плотность делают дендримеры перспективными объектами для получения их кристаллических форм.

Именно монодисперсность дендримеров позволяет искать пути получения их монокристаллов. Современные методы структурной характеризации, в том числе рентгеноструктурный анализ и метод малоуглового рентгеновского рассеяния с использованием синхротронных и лабораторных источников излучения, позволяют определить условия формирования таких надмолекулярных структур, которые необходимы для перехода из аморфной или мезоморфной фаз дендримеров в кристаллическое состояние.

Данные малоуглового рентгеновского рассеяния карбосилановых дендримеров в растворе гексана показывают, что, начиная с третьей генерации, дендримеры представляют собой монодисперсные сферические частицы, размер которых зависит от номера генерации [1]. Зондовая микроскопия демонстрирует, что на подложке сферические частицы дендримеров образуют плотную гексагональную упаковку.

Получение кристаллов частиц карбосилановых дендримеров позволит определить их строение с атомным разрешением.



а *б*

*Рис.1. Карбосилановые дендричимеры: а - схематическое изображение структуры дендримеров; б - АСМ-топография участка поверхности участка 500х500 нм пленки **G64**, перенесенной методом ЛБ на свежесколотую слюду при $\pi = 8$ мН м$^{-1}$. На вставке: двумерное Фурье-преобразование изображения.*

[1] Э.В. Штыкова, Л.А. Фейгин и др. // Кристаллография, 2016, том 61, № 5, с. 781-792.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНОКЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ: ЭФФЕКТ ПАССИВАЦИИ ОБОРВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СВЯЗЕЙ АТОМАМИ ВОДОРОДА

Фокина Н.С.[1], Батурин В.С[1]., Лепешкин С.В.[1], Кулатов Э.Т.[2], Успенский Ю.А.[1], Асланов Л.А.[3], Кудрявцев И.К.[3]

[1] *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

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

[3] *Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

e-mail: ikk@struct.chem.msu.ru

Свойства наночастиц кремния радикально отличаются от свойств объёмных образцов. Ключевую роль в этом явлении играет структура нанообъекта. Простейшее представление о нём, как о малом фрагменте кристалла, очень далеко от действительности. Атомы, находящиеся на поверхности частицы, имеют меньшее число соседей, а часть их орбиталей не участвует в межатомной связи. Это заставляет наночастицу перестраивать свою структуру так, чтобы число разорванных связей было минимальным. Чтобы исследовать этот эффект, мы провели глобальную первопринципную структурную оптимизацию и исследовали термодинамическую стабильность кластерах кремния Si_n и Si_nH_m с $n \leq 14$ и $m \leq 24$. Для нахождения равновесной структуры использовался эволюционный алгоритм, реализованный в коде USPEX, позволяющий эффективно находить абсолютный минимум на поверхности полной энергии кластера, имеющей очень сложный рельеф. Пассивация кластеров кремния атомами водорода уменьшает число разорванных связей, что приводит к значительному различию в структуре кластеров Si_n и Si_nH_m. Этот прием часто используется и в экспериментальных исследованиях квантовых наноточек кремния для снижения их химической активности. Представленная работа детально исследует данный вопрос и указывает оптимальную степень пассивации, приводящую к наивысшей стабильности кластеров кремния. В связи с этим проверяется гипотеза о соответствии структурной флуктуации и структурного ансамбля при зародышеобразовании кристаллов [1].

[1] Aslanov L.A. Acta Crystallographica, Section B // 1988, V. 44, pp. 449-458.

СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ Ti-СОДЕРЖАЩИХ И МОДИФИЦИРОВАННЫХ ДИОКСИДОМ ТИТАНА АПАТИТОВ

Франк-Каменецкая О.В.[1,2], Кузьмина М.А.[1], Хамова Т.В.[2], Шилова О.А.[2], Челибанов В.П. [3], Маругин А.М.[3], Ясенко Е.А.[3], Молодцова К.А.[1,2]

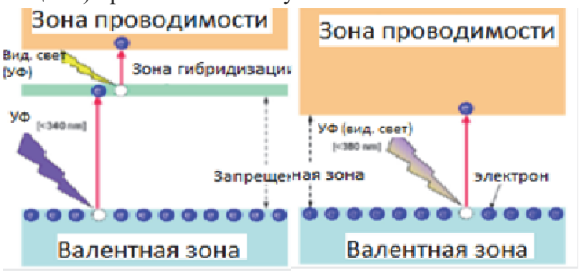
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет*

[2] *ИХС РАН им. В.Я. Гребенщикова*

[3]*ЗАО «ОПТЭК»*

e-mail: ofrank-kam@mail.ru

Благодаря биосовместимости апатит широко используется в медицине. Модифицированные титаном апатиты обладают уникальными фотокаталитическими (рис.1) и антибактериальными свойствами [1]. Механизмы взаимодействия ионов Ti^{4+} с апатитом в связи с их влиянием на фотокатолитическую активность исследованы недостаточно. Закономерности вхождения катионов титана в апатит (предельные концентрации, распределение по позициям) практически не изучены.



а **б**

Рис.1 Фотокаталитические модели: а — Ti-содержащий гидроксилапатит, б –анатаз [1]

В настоящей работе Ti-содержащие гидроксил- и фторапатиты (OHAP и FAP) получены методом осаждения при T = 90°C. Соотношение Ti/Ca в растворах варьировало от 0 до 0,79. Вхождение катионов Ti^{4+}в апатит (преимущественно в позиции Ca) подтверждено значимыми обратными корреляциями между пэя и содержанием титана. В OHAP при концентрациях >0.13 катионы Ti^{4+}входят преимущественно в позицию P, что сопровождается резким увеличением пэя. Максимальные концентрации катионов Ti^{4+} соответствуют соотношениям Ti/Ca 0,15 и 0,68 для OHAP и FAP соответственно.

Анатаз-апатитовые композиты с сотношением TiO2 / OHAP = 0,28 - 0.97 получены золь-гель методом. С использованием золей, содержащих 40% ТБТ. Фотокаталитическая активность композитов больше активности Ti – содержащих апатитов и близка к активности коммерческих фотокатализаторов.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ (проект № 3.38.243.2015) с использованием оборудования ресурсных центров «Рентгендифракционные методы исследования вещества», «Нанотехнологии « и «Геомодель».

[1] M. Tsukada et al./Journal of Molecular Catalysis A, 2011, Chemical 338, p.18–23

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ФЕРРОБОРАТОВ $RFe_3(BO_3)_4$ (R = Y, Nd, Sm, Gd, Ho)

Фролов К.В.[1], Любутин И.С.[1], Смирнова Е.С.[1], Алексеева О.А.[1], Верин И.А.[1], Безматерных Л.Н.[2], Гудим И.А.[2]

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

[2] *Институт физики им Л.В.Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

e-mail: green@crys.ras.ru

В последние годы значительный интерес вызывают исследования мультиферроиков, обладающих большой величиной магнитоэлектрического эффекта. К подобным материалам относятся редкоземельные ферробораты $RFe_3(BO_3)_4$ (R – редкоземельный элемент), в которых наличие двух магнитных подсистем: ионов железа и редкоземельных ионов формирует разнообразие наблюдаемых свойств [1].

Методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe и рентгеноструктурного анализа исследованы динамика магнитных фазовых переходов, структурные, электронные и спиновые состояния ионов железа в монокристаллах редкоземельных ферроборатах $RFe_3(BO_3)_4$ (R = Y, Nd, Sm, Gd, Ho) в интервале температур 5 – 480 К. Изучено взаимодействие редкоземельной и железной магнитных подсистем. Показано влияние на кристаллическую структуру возникающего в них при температурах ниже 40 К магнитного упорядочения. В соединениях $YFe_3(BO_3)_4$ и $NdFe_3(BO_3)_4$ в области магнитного фазового перехода обнаружен температурный гистерезис сверхтонких мёссбауэровских параметров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-02-00483а) и РНФ (грант № 16-12-10464).

[1] А.М. Кадомцева, Ю.Ф. Попов и др. // Физика низких температур, 2010, том 36, № 6, с. 640–653.

УДИВИТЕЛЬНЫЙ РОСТ ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛОВ ГЕЛИЯ

Цымбаленко В.Л.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: vlt49@yandex.ru

Уникальные свойства сверхтекучего гелия - колоссальная теплопроводность и отсутствие вязкости, выделили кристаллы гелия как наиболее подходящий объект для изучения фундаментальных механизмов роста кристаллов из жидкости. Помимо хорошо известных процессов роста поверхности, таких как двумерное зародышеобразование и кристаллизация за счет ростовых дефектов, обнаружены два ранее неизвестных явления: сверхмедленный и сверхбыстрый граней кристалла. За двадцатилетний период изучения этих эффектов измерены многочисленные параметры явлений, но так и не найдено их физическое объяснение.

[1] Цымбаленко В.Л. // УФН, 2015, том 185, № 11, с 1163-1178.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ ПЕРОКСОСОЛЬВАТОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Чураков А.В., Приходченко П.В., Медведев А.Г., Михайлов А.А., Навасардян М.А.

ИОНХ РАН, Москва

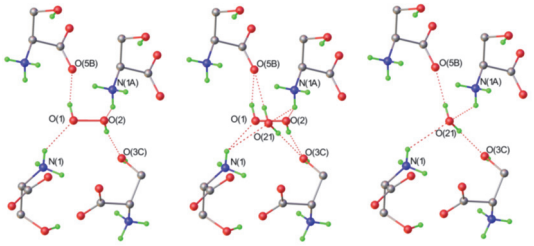
churakov@igic.ras.ru

Перекись водорода - эффективный и экологичный окислитель, широко применяемый в медицине и промышленности. Она играет ключевую роль в ряде биохимических процессов. Особенностью перекиси является способность образовывать сетки прочных водородных связей в конденсированных фазах.

Основная проблема химии персольватов – их малая стабильность. Они представляют собой кристаллические соединения, и их устойчивость определяется типом, количеством, топологией и энергетикой Н-связей.

В структурных базах данных имеются сведения о 68 истинных персольватах (без связи металл-пероксид). Из них более трети выполнены нашей группой[1-3]. Показано, что молекула H_2O_2 всегда образует не менее 2-х водородных связей, причем структурообразующими всегда являются донорные связи HOOH…X (X = O, N, Hal).

Установлено, что изоморфное замещение молекул перекиси на воду является не экзотическим явлением, найденным для пары неорганических солей, а представляет характеристическое свойство большинства органических и островных персольватов[1], причем содержание примесной воды антибатно концентрации пероксида в маточных растворах.



Для получения свободных от изоморфно включенной воды соединений нами предложено использовать концентрированные растворы перекиси (до 98%). Обнаружено, что некоторые пероксосольваты возможно получить только таким способом. В ряде случаев полиморфный и сольватоморфный составы сильно зависит от условий кристаллизации, в первую очередь от концентрации пероксида[3]. Получены персольваты с рекордным содержанием пероксида – $C_2H_5NO_2 \cdot 1.5H_2O_2$ (41%) и $C_3H_7NO_2 \cdot 2H_2O_2$ (43%)[2].

[1] A.A.Mikhaylov, A.G.Medvedev, A.V.Churakov et al., O.Lev, Chem.Eur.J., 2016, 22, 2980.

[2] P.V.Prikhodchenko, A.G.Medvedev, T.A.Tripol'skaya et al., O.Lev, Cryst.Eng.Comm., 2011, 13, 2399.

[3] A.V.Churakov, P.V.Prikhodchenko, J.A.K.Howard, Cryst.Eng.Comm., 2005, 7, 664.

ИЗОМОРФИЗМ В ПИРОКСЕНОИДАХ РЯДА ПИРОКСМАНГИТ-ПИРОКСФЕРРОИТ

Щипалкина Н.В.[1,2], Аксёнов С.М.[1,3], Пеков И.В.[2], Чуканов Н.В[4], Расцветаева Р.К.[1]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*Московский государственный университет*

[3]*Институт элементоорганических соединений РАН*

[4]*Институт проблем химической физики РАН*

E-mail: aks.crys@gmail.com

Семейство пироксенов и пироксеноиидов содержит, в частности, минералы с общей формулой $M^{2+}{}_x[Si_xO_{3x}]$, где *M* – Ca, Mn, Fe, Mg, а *x* – число SiO_4-тетраэдров в периоде повторяемости кремнекислородной цепочки [1]. Методом рентгеноструктурного анализа исследованы два представителя группы пироксмангита (x=7) из ксенолитов базальтов палеовулкана Беллерберг (Айфель, Германия): Ca, Mn-содержащий пироксферроит и высокожелезистый Mg-содержащего пироксмангит. Параметры триклинных ячеек (пр. гр. *P*-1): a=6.662(1), b=7.525(1), c=15.895(2) Å, α=91.548(3), β=96.258(3), γ=94.498(3)º для пироксферроита и a=6.661(3), b=7.513(3), c=15.877(7)Å, α=91.870(7), β=96.369(7), γ=94.724(7)º для пироксмангита. Структуры уточнены до R = 4.22% [2568 $I > 2\sigma(I)$] для пироксферроита и R = 3.94% [3825 $I > 2\sigma(I)$] для пироксмангита; кристаллохимические формулы: $^{M(1\text{-}2)}(Mn_{0.5}Ca_{0.4}Na_{0.1})_2{}^{M(3\text{-}6)}(Fe,Mn)_4{}^{M7}(Mg_{0.6}Fe_{0.4})[Si_7O_{21}]$ и $^{M(1\text{-}3)}(Mn,Fe)_3{}^{M(4\text{-}6)}[(Fe,Mn)_{0.7}Mg_{0.3}]_3{}^{M7}[Mg_{0.5}(Fe,Mn)_{0.5}][Si_7O_{21}]$, соответственно. Анализ распределения катионов по позициям во всех структурно изученных представителях ряда пироксмангит-пироксферроит позволяет говорить о структурном положении Ca и Na в *M*1- и *M*2-семивершинниках. Кроме того, нахождение Mn^{2+} в этой позиции предпочтительнее, чем Fe^{2+}. Магний формально может присутствовать во всех *M*-позициях, но наиболее подходящей для него является позиция $M7O_5$-пятивершинника, которая характеризуется наименьшим средним расстоянием катион-анион.

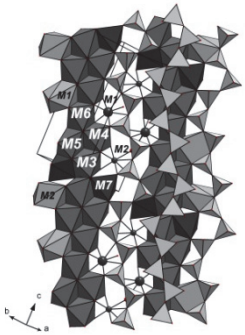


Рис. 1. Кристаллическая структура минералов группы пироксмангита.

[1] *Минералы*. Справочник, том 3, вып 2, М.: Недра, 1981, 613 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 16-35-60101-мол-а-дк и Президента МК-8033.2016.5.

МИНЕРАЛОГИЧЕСКИЙ РЕСУРС ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ: КРИСТАЛЛОХИМИЯ «АЛЛЮОДИТОВ» В КОНТЕКСТЕ ДЕТАЛИЗАЦИИ СИСТЕМАТИКИ

Якубович О.В.[1,2]

МГУ им. М.В. Ломоносова

ИГЕМ РАН

e-mail: yakubol@geol.msu.ru

Неослабевающий интерес к исследованию кислородных соединений переходных и щелочных металлов обусловлен, в первую очередь, перспективностью их использования в портативных источниках энергии. Современные материалы такого рода представляют собой, в частности, синтетические разновидности минералов: трифилина, литиофосфата, триплита, натисита, шпинели, браннерита, сидоренкита и др. Еще одна группа интенсивно изучаемых в этом плане соединений – структурные аналоги минерала аллюодита, $NaCaMnFe_2(PO_4)_3$. Так, установлена перспективность «аллюодита» $Na_2FeCo_2(PO_4)_3$ в качестве катода для натриевых батарей.

Кристаллическая структура $KCuMn_3(VO_4)_3$ уточнена нами на базе рентгеновского эксперимента (R = 0.0355) и проанализирована в сопоставлении с родственными структурами «аллюодитов» фосфатов, арсенатов и ванадатов. Показано, что вариации в строении катионного каркаса в структурах семейства аллюодита определяются типом атомов металла, заселяющих *A*-позиции в каналах каркаса из октаэдров и тетраэдров. Подавляющее большинство аллюодитоподобных соединений концентрируется в пределах трех основных подгрупп: йохиллерита, аллюодита и ящганита, причем ванадаты и фосфаты разделяются между первой и второй, тогда как арсенаты занимают промежуточное положение, участвуя в составе обеих подгрупп. Подгруппу йохиллерита формируют исключительно Cu-содержащие арсенаты и ванадаты; при этом атомы Cu в степени окисления 2+ всегда занимают позицию *A*(1)', заселяя ее полностью и не допуская изоморфизма. Подгруппа аллюодита содержит фосфаты и арсенаты преимущественно щелочных (чаще всего Na в *A*-позициях) и переходных металлов. Специфической особенностью подгруппы ящганита, является присутствие в ее составе исключительно гидратированных арсенатов и фосфатов.

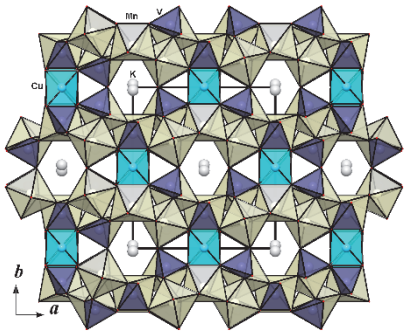


Рис.1. Кристаллическая структура $KCuMn_3(VO_4)_3$ в проекции *xy*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ $GaAs$, GaP, $GaAs_{0.75}N_{0.25}$, $GaAs_{0.25}P_{0.75}$ ($F\underline{4}3m$)

Абгарян К.К..[1,2], Бажанов Д.И.[1,3], Сеченых П.А.[1,2]
[1] ФИЦ «Информатика и управление» РАН
[2] МАИ (национальный исследовательский университет)
[2] МГУ имени М.В.Ломоносова
e-mail: kristal83@mail.ru

В связи с многообразием кристаллических структур большое значение имеет разработка системных подходов к решению задачи моделирования кристаллических структур твердых тел, что позволяет существенно сократить число экспериментов и время проведения расчетов. Одним из важных этапов при расчете структурных характеристик материалов с заданной химической формулой является определение метрических параметров кристаллических структур. Начальные данные могут быть получены на основе простых моделей, таких как модель плотной упаковки для ионных кристаллов или модель Полинга для материалов с ковалентным типом связи. Полученные с их помощью значения метрических параметров, таких как координаты базисных атомов и постоянные решетки, служат входными данными при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [1,2], с помощью которых можно рассчитать полную энергию системы атомов, уточнить геометрию, динамические, электронные, магнитные, механические и многие другие её свойства.

В данной работе методы компьютерного моделирования применяются для расчета структурных характеристик соединений A^3B^5 (кубическая симметрия, тип решетки сфалерит, тип симметрии $F\underline{4}3m$). В первом приближении метрические параметры рассматриваемых структур рассчитывались с помощью оптимизационной математической модели, описанной в [3]. В ходе программной реализации алгоритмов решения данной задачи была построена база данных по пространственным группам симметрии. Для хранения данных о преобразованиях симметрии, которые содержатся в каждой пространственной группе использовался новый подход, представленный в [4]. Важной особенностью такого способа хранения данных является компактность их представления. Кроме того, он удобен при хранении, чтении и машинной интерпретации дробных чисел. Такой подход позволил существенно ускорить процесс расчета входных данных для дальнейших исследований. На следующем этапе данные уточнялись и изучались электронные свойства с применением квантовомеханических расчетов программным комплексом VASP (http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp//). Разработанные подходы позволили определить атомно-кристаллическую структуру $GaAs$ и рассчитать ее электронные свойства. Далее была рассмотрена кристаллическая структура и свойства GaP. Также с помощью компьютерного моделирования были изучены кристаллические структуры $GaAs_{0.75}N_{0.25}$ и $GaAs_{0.25}P_{0.75}$ ($F\underline{4}3m$) и спрогнозированы их возможные электронные свойства.

Работа выполнена за счет средств проекта Российского научного фонда № 14-11-00782 в ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН

[1] Hohenberg, P. Phys. Rev. 136, B864 / P. Hohenberg, W. Kohn // 1964.

[2] Kohn, W. Phys. Rev. 140, A1133 / W. Kohn, L. J. Sham // 1965.

[3] Абгарян К.К., Хачатуров В.Р., Компьютерное моделирование устойчивых структур кристаллических материалов// Ж. вычисл.матем. и матем. физ., 2009. Т. 49. № 8. С. 1517-1530.

[4] M. De Graef, M. McHenry Structure of materials (2nd edition) // Cambridge University Press, 2012 – 767c.

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ ПОДЛОЖКИ НА ЗАРОЖДЕНИЕ, ФОРМУ И ФОРМИРОВАНИЕ ПОР В КРЕМНИИ ПРИ ЕГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМ ТРАВЛЕНИИ В РАСТВОРАХ ФТОРСТОВОДОРОДНОЙ КИСЛОТЫ

Абрамова Е.Н., Сыров Ю.В., Хорт А.М.,
Яковенко А.Г., Прохоров Д.В.
Московский технологический университет
(Институт тонких химических технологий)
e-mail: anavenko@yandex.ru

Изучение процесса формирования слоев пористого кремния (ПК) показали его зависимость от целого ряда факторов, таких как: время и плотность тока травления, параметры исходного кремния, состав травителя и другие. Однако, до настоящего времени нет четкой градации степени влияния данных факторов на параметры получаемых слоев и то как данные параметры влияют на строение слоев ПК. Таким образом, целью данной работы является выявление влияния на слои ПК одного из значительных параметров системы, а именно кристаллографической ориентации подложки.

Исследование процесса зарождения и формирования пор в n-Si в процессе его электрохимического травления в растворах фтористоводородной кислоты выявило, что кристаллографическая ориентация подложки является одним из основных факторов, влияющие на формирование слоев ПК. Проведенные исследования показали, что кристаллографическая ориентация подложек оказывает определяющее влияние на расположение пор относительно поверхности самой подложки (плоскости травления). Исследование механизма электрохимического травления n-Si, приводящего к образованию слоев ПК, выявило, что данное влияние связано с участием в процессе образования пор иона $(HF_2)^-$ в качестве основного иона-травителя. Особенности строения и размеров данного иона во взаимосвязи с размерами кристаллографической ячейки кремния обеспечивает не только определенное пространственное расположение пор в объеме n-Si, но также влияет и на форму поперечного сечения самих пор. На основе полученных данных была выведена математическая формула, позволяющая описывать форму полученных пор.

Результаты получены в рамках государственного задания Министерства Образования и Науки Российской Федерации №2014/114 код проекта 150

Грант Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ РФ (НШ-7946.2016.11.)

ФОСФАТ-ВАНАДАТНЫЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ И ЛАЗЕРНЫЕ КРИСТАЛЛЫ $Ca_9Y(VO_4)_{7-x}(PO_4)_x$: СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

Аксенов С.М.[1], Космына М.Б.[2], Шеховцов А.Н.[2], Стефанович С.Ю.[3,4]

[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] *Институт монокристаллов НАНУ*

[3] *Физико-химический институт имени Л.Я.Карпова*

[4] *МГУ имени М.В. Ломоносова*

e-mail: aks.crys@gmail.com

Ванадаты и фосфаты со структурным типом витлокита обладают ацентричной структурой и перспективны для использования в технике в качестве лазерных и нелинейных элементов. Для соединений $Ca_9R(VO_4)_7$ (R = *REE* или Y) характерен фазовый переход в интервале 900-1000°C, что негативно сказывается на качестве монокристаллов, получаемых вытягиванием из расплава. Фосфатные аналоги не могут быть получены в виде монокристаллов в силу инконгруэнтного характера плавления. Нами синтезированы кристаллы состава $Ca_9Y(VO_4)_{7-x}(PO_4)_x$ и изучены их свойства.

Исходные соединения $Ca_9Y(VO_4)_7$ и $Ca_9Y(PO_4)_7$ получены методом твердофазного синтеза и затем смешаны в пропорции $Ca_9Y(VO_4)_{7-x}(PO_4)_x$, где x = 0, 1, 3, 4. Выращивание монокристаллов проводилось в установке «Кристалл 3М» с индуктивным нагревом и автоматизированной системой контроля диаметра растущего кристалла. Размеры кристаллов: диаметр – до 25 мм, длина до 60 мм. Для снятия термоупругих напряжений кристаллы проходили пострстовой отжиг при 1000°C в воздушной атмосфере в течение 12 часов.

Кристаллические структуры соединений с x = 0, 1, 3 при комнатной температуре характеризуются пр. гр. $R3c$. Для чистого $Ca_9Y(VO_4)_7$ наблюдается фазовый переход сегнетоэлектрического типа при T = 942°C. При x = 4 температура перехода резко падает и структура становится центросимметричной. Методом рентгеноструктурного анализа изучена структура кристалла состава $Ca_9Y(VO_4)_3(PO_4)_4$ (пр. гр. $R\bar{3}c$ при комнатной температуре) (рис. 1).

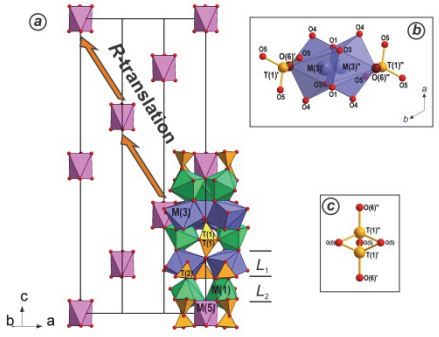


Рис. 1. Кристаллическая структура $Ca_9Y(VO_4)_3(PO_4)_4$: общий вид (a) и особенности разупорядочения катионов (b-c).

Работа поддержана программой ESF Mobilitas (MTT83) и грантами РФФИ 14-03-00480, 16-35-60101.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА Cu_4SeTe

Амирасланов И.Р.[1], Азизова К.К.[1], Алиева М.Х.[2]

[1] *Институт Физики НАН Азербайджана*

[2] *Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности*

e-mail: kama-azizova@rambler.ru, iamiraslan@gmail.com

При изготовлении тонкопленочных солнечных элементов халькогениды меди по долгосрочной стабильности и высокой эффективности успешно конкурируют с такими материалами, как CdTe и $Cu(In,Ga)Se_2$. Соединения Cu_2Se и Cu_2Te имеют различные кристаллические структуры, им характерна политипия. Следовательно, исследования тройных соединений $Cu_2(Se,Te)$ имеют теоретическую и практическую значимость.

Образцы Cu_4SeTe были синтезированы в кварцевой ампуле при 1300 К путем расплавления элементов Cu, Se и Te, взятых в стехиометрических соотношениях и для гомогенизации выдержались 5 дней при температуре 750 К. Рентгеновские эксперименты проведены на дифрактометре XRD D8 ADVANCE (Germany), режим съемки: 40 кВ, 40 мА, Cu-K_α излучение $10^\circ < 2\theta < 120^\circ$.

Установлено, что образец кристаллизуется в тригональной сингонии с периодами решетки: a=4.178, c=41.921 Å, пр.гр. $R\bar{3}m$, Z=6. Кристаллическая структура определена с использованием программ EVA и TOPAS (Bruker) и уточнена методом Ритвельда, фактор расходимости $R_{Брегг}$=0.0246.

Расшифровка Cu_4SeTe показала, что основу составляют кубически плотноупакованные (КПУ) фрагменты четырех анионных (X=Se,Te) слоев, составом $_\infty(Cu_6X_4)^{2-}$=-$_\infty(Cu_6Se_2Te_2)^{2-}$. Идентичные блоки, чередующиеся перпендикулярно оси *c,* соединяются в единый каркас, двухслойными блоками атомов меди $_\infty(2Cu)^{2+}$. Следовательно, причиной формирования нового структурного типа с нарушением КПУ укладки является замещение половины анионов Se с атомами Te.

Структура $NaCu_6Se_4$ [1] характеризуется с близкими параметрами элементарной ячейки: R3-m, a = 4.0465(3) Å; c = 41.493(5) Å. В докладе приводится сравнительный анализ этих структур.

[1] Sturza M., Malliakas C.D., Bugaris D.E., Han F., Chung D.Y., Kanatzidis M.G. // Inorg Chem. 2014; **53**(22), 12191-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИСКАЖЕНИЙ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИЭДРОВ SB(V) И BI(V)В КРИСТАЛЛАХ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ

Андреев П.В., Сомов Н.В., Чупрунов Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
e-mail: andreev@phys.unn.ru

Предложен новый метод количественной оценки степени подобия двух координационных полиэдров (КП). Численная характеристика степени подобия двух КП Ф зависит от межатомных расстояний и валентных углов в КП, принимает значения в интервале от 0 до 1. При Ф=1 КП подобны друг другу.

В данной работе были рассмотрены 5-вершинники первой координационной сферы металлов в кристаллах металлорганических комплексов Sb(V) и Bi(V). Структурная информация получена в Кембриджском банке структурных данных. Набор эталонных полиэдров был задан правильной тригональной бипирамидой, правильной тетрагональной пирамидой (полуоктаэдром) и правильной тетрагональной пирамидой с центром описанной сферы в центре масс. Всего было исследовано 428 структур металлорганических комплексов Sb(V) и Bi(V).

На рис. каждый исследуемый полиэдр обозначен одной точкой, соответствующей эталонному полиэдру с наибольшей степенью подобия Ф. Для удобства изображения по горизонтали отложена степень тригональности τ [1].

Для 5-координационных полиэдров сурьмы и висмута расчет Ф позволяет сделать выбор между искаженным тригонально-бипирамидальным и тетрагонально пирамидальным описанием КП. Также позволяет количественно сравнивать степень искажения КП в разных кристаллических структурах.

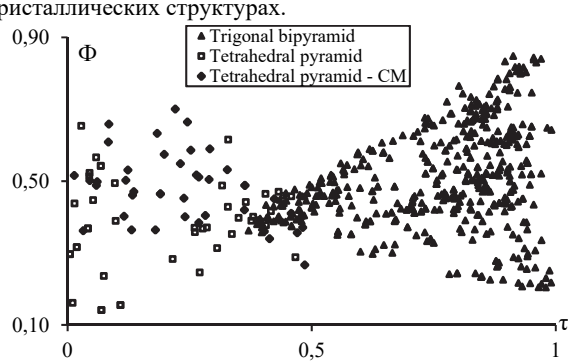


Рисунок. Расчет степеней подобия правильным полиэдрам координационных полиэдров Sb(V) и Bi(V) кристаллов металлоорганических комплексов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-33-00752 мол_а) и в рамках базовой части государственного задания №2014/134 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности. Код проекта 2312.

[1]. Addison A.W., et al. // J. Chem. Soc. Dalton Trans. 1984. № 7. P. 1349.

СТРУКТУРА МИЦЕЛЛ В СМЕШАНОМ ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПАВ – ПОЛИМЕР

Артикульный А.П.[1,3], Петренко В.И.[1,3], Булавин Л.А.[3], Алмаши Л.[4] Аксенов В.Л.[1,2], Авдеев М.В.[1,2]
[1] Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований
[2] Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт»
[3] Физический факультет, Киевский национальный Университет
[4]Физический исследовательский центр им. Вигнера,
e-mail: artikulnyy@ukr.net

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

В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов были исследованы параметры взаимодействия мицелл в водном растворе олеат натрия и влияние на значения этих параметров добавление полимера полиэтиленгликоль (ПЭГ) различной молекулярной массы. Обнаружена и проанализирована зависимость числа агрегации (N_{agg}), степени ионизации (α), отношения полуосей (γ), среднего размера (D, нм), заряда (e) и поверхностного потенциала (ψ, мэВ) мицеллы, а также обратной длины экранирования (k, $нм^{-1}$) от концентрации олеата натрия и присутствия/отсутствия полиэтиленгликоля [1].

Результаты тензиометрического эксперимента на водных растворах ПЭГ различной молекулярной массы и олеата натрия показали наличие комплексов ПАВ - полимер и значения критической концентрации агрегации (ККА) и мицеллообразования (ККМ)

Полученный результат имеет практическую пользу для более глубокого понимания влияния биосовместимого полимера ПЭГ на структурную реорганизацию водных феррофлюидов стабилизированных олеатом натрия [2,3].

[1] V.I.Petrenko, M.V.Avdeev, V.M. Garamus, L.A. Bulavin, P. Kopcansky //Col. Surf. A, 2015, 480, с 191-196.

[2] Y.Zhang, N.Kohler, M,Zhang // Biomaterials 2002, 23, с 1553.

[3] A.Gabizon, et al. Adv. Drug Delivery Rev. 2004, 56, с 1177.

СЛОЖНЫЕ СТРУКТУРЫ ФАЗ В СПЛАВАХ Au – Cd: МЕХАНИЗМ ЮМ-РОЗЕРИ КАК ОБОСНОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФАЗ

Афоникова Н.С., Дегтярева В.Ф.
Институт Физики Твердого Тела РАН
e-mail:natasha@issp.ac.ru

Классической системой фаз Юм-Розери является система Cu-Zn, в которой проявляется последовательность фаз ГЦК – ОЦК – сложная кубическая – ГПУ при изменении электронной концентрации (1.36 – 1.5 – 1.61 – 1.75). Система Au-Cd является изоэлектронной относительно Cu-Zn, но содержит наряду с относительно простыми структурами целый ряд сложных интерметаллических соединений с различными искажениями, сверхрешетками и вакансиями [1]. Сложная картина фаз Au-Cd по сравнению с Cu-Zn связана с переходом к более тяжелым элементам в тех же группах. Это приводит к усилению значимости электронной составляющей для формирования кристаллической структуры. Чтобы понять причины образования таких сложных структур и устойчивости таких фаз, мы проанализировали эти кристаллические структуры с помощью модели почти свободных электронов в рамках взаимодействия сферы Ферми и зоны Бриллюэна. Анализ конфигурации Бриллюэна – Джонса по отношению к сфере Ферми с почти свободными электронами обеспечивает понимание значения вклада энергии валентных электронов для устойчивости структур [2,3]. Представление сложных структур в обратном пространстве проясняет их отношение к простым базисным ячейкам. Такой подход показывает важность дополнительных плоскостей для стабильности сверхрешеток.

Показано, что сложные структуры AuCd-*hP*18, $AuCd_3$-*hP*24 и $AuCd_4$-*hP*273 связаны с простой структурой AuCd-*cP*2 введением ромбоэдрических искажений со сверхструктурами и вакансиями. Подобный анализ позволяет понять образование сложных структур в щелочных и щелочно-земельных металлах при высоком давлении. Фазы с host – guest структурой имеют кристаллографическое родство с Au_3Cd_5-*tI*32 – типичной фазой Юм–Розери.

[1] Degtyareva V.F., Afonikova N.S. // Solid State Sciences, 2015, T. 49, p 61-67.

[2] Дегтярева В.Ф. // УФН, 2006, том 174, с 383-402.

[3] Degtyareva V.F., Smirnova I.S. // Z. Kristallogr., 2007, T. 222, p 718-721.

К ВОПРОСУ О ПРИРОДЕ ПРИМЕСЕЙ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БЕЛКОВ

Баскакова С.С.[1], Волков В.В.[1], Лаптинская Т.В.[2], Лясникова М.С.[1], Волошин А.Э.[1]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2]МГУ им.М.В. Ломоносова
e-mail: SvetlBaskakova@yandex.ru

Выращивание кристаллов лизоцима с использованием шестикратно перекристаллизованного белка фирмы Seikagaku Corporation позволяет получить крупные кристаллы, тогда как при использовании трехкратно перекристаллизованных реактивов фирм Sigma-Aldrich и Hampton Reserch при тех же условиях кристаллы либо не выпадали вообще, либо образовывалось большое количество мелких кристаллов. Растворы лизоцима были исследованы с помощью методов динамического светорассеяния, малоуглового рентгеновского рассеяния, ультрацентрифугирования и электрофореза на предмет наличия в растворе димеров, которые, согласно теории, влияют на образование и скорость роста кристаллов.

В результате было установлено, что растворы лизоцима без осадителя не содержат олигомеров. При добавлении осадителя содержание высокомолекулярных частиц во всех исследованных растворах составляет несколько процентов. Результаты ДРС говорят о том, что степень агрегации молекул растет по мере увеличения пересыщения, что является естественным отражением предкристаллизационного состояния раствора. Однако оказалось, что именно растворы наиболее чистого, шестикратно перекристаллизованного реактива не только обеспечивают наилучший рост кристаллов, но также содержат и наибольшее количество олигомеров. По всей видимости, процессы образования кристаллов и ассоциатов белковых молекул связаны между собой и сходным образом подвержены влиянию примесей, которыми могут быть, например, продукты денатурации белковых молекул.

По-видимому, сами по себе олигомеры, не влияют на рост кристаллов белка, а ввиду малости их содержания в растворе не могут быть основными строительными единицами, однако, могут достаточно легко встраиваться в решетку кристалла.

ДИЗАЙН, СИНТЕЗ, СТРУКТУРА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ХАЛЬКОГЕНИТ ГАЛОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ НОСИТЕЛЕЙ КВАНТОВЫХ МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Бердоносов П.С., Долгих В.А.

[1] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

e-mail: berdonosov@inorg.chem.msu.ru

Формирование магнитной подсистемы пониженной размерности в твердом теле в значительной степени связано с особенностями кристаллической структуры соединений. Очевидно, что вероятность обнаружить искомую конфигурацию магнитных ионов высока в фазах с низкомерной кристаллической структурой (2D, 1D или 0D). С этих позиций привлекательным объектом для поиска искомых соединений являются селениты и теллуриты переходных металлов, вследствие наличия в селенитной и теллуритной группировке стереохимически активных пар электронов, обуславливающих тенденцию к упорядоченному размещению и ассоциации в пространстве атомов селена и теллура в халькогенитных кристаллах. В результате происходит образование слоистых соединений (2D) или формирование (1D, 0D) структур, и как следствие, – распределение в пространстве атомов переходных металлов, благоприятное для возникновения в кристаллах явлений квантового магнетизма.

Нами синтезированы, структурно и магнитно охарактеризованы фазы содержащие системы пониженной магнитной размерности из ионов Cu^{2+} S = 1/2 $Sr_2M(SeO_3)_2Cl_2$ (M = Co, Ni, Cu), $SrCu_2(SeO_3)_2Cl_2$, $CaCu_2(SeO_3)_2Cl_2$, $PbCu_2(XO_3)_2Cl_2$ (X= Se, Te), а также квазиодномерная фаза на ионах Fe^{3+} S = 5/2 $Bi_2Fe(SeO_3)_2OCl_3$. Интересно отметить, что, несмотря на схожесть химического состава, соединения с медью кристаллизуются в разных структурных типах и магнитное поведение их различно. $PbCu_2(SeO_3)_2Cl_2$ изоструктурен с $SrCu_2(SeO_3)_2Cl_2$, в то время как $PbCu_2(TeO_3)_2Cl_2$ схож с $CaCu_2(SeO_3)_2Cl_2$. Магнитное поведение этих фаз описывается схожими моделями.

Фаза $Bi_2Fe(SeO_3)_2OCl_3$ содержит в своей структуре цепочки, составленные из соединенных по апикальным вершинам октаэдров $Fe^{3+}O_6$ (S = 5/2), которые разделены группами BiO_4Cl_3, BiO_3Cl_3 и SeO_3. На температурной зависимости магнитной восприимчивости этого соединения присутствует широкий корреляционный максимум при T_{max} ≈ 130 K, который свидетельствует о магнитных корреляциях ближнего порядка в цепочке.

Работа поддержана проектами РФФИ 16-03-00463 и 14-03-00604.

УТОЧНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ ОРТОБОРАТА $LuBO_3$ МЕТОДОМ РИТВЕЛЬДА

Бирюков Я.П.[1], Кржижановская М.Г.[1,2], Бубнова Р.С.[1,2], Филатов С.К.[2]

[1] Институт химии силикатов РАН

[2] СПБГУ, ИНоЗ, каф. кристаллографии

e-mail: y.p.biryukov@gmail.com

Известны следующие полиморфные модификации $LuBO_3$ – структурного типа псевдоволластонита (метастабильная π- и стабильная μ- фазы), с. т. кальцита (β) и HT-$LuBO_3$ (высокотемпературная фаза, незакаляемая). Нами [1] были синтезированы все полиморфные модификации, исследовано и описано термическое поведение, определены параметры тензора термического расширения β- и μ-$LuBO_3$, в частности, исследован обратимый фазовый переход μ-$LuBO_3$ ↔ HT-$LuBO_3$.

В настоящей работе методом Ритвельда при комнатной температуре (Rigaku Utima IV, CuK_α, 2θ = 10–120°) впервые уточнена структура π-$LuBO_3$ в с. т. псевдоволластонита, пр. гр. $C2/c$ (R_B = 0.066); методом ИК-спектроскопии при комнатной температуре (Shimadzu UV-2550 PC, 390–4000 $см^{-1}$) обнаружено присутствие не только тетраэдров BO_4, но и треугольников BO_3, вследствие чего типичное для псевдоволластонита замкнутое кольцо B_3O_9, сложенное тетраэдрами BO_4, вероятно, оказывается раскрытым, как было показано для μ-$LuBO_3$ в [2]. Структура μ-$LuBO_3$ также уточнена в с. т. псевдоволластонита, пр. гр. $C2/c$ (R_B = 0.032), что согласуется с данными [2].

Структура HT-$LuBO_3$ впервые уточнена методом Ритвельда при 1100 °C выше обратимого фазового перехода μ-$LuBO_3$ ↔ HT-$LuBO_3$. Подробные исследования продолжаются.

Работа была выполнена в рамках гранта РФФИ 15-03-05845. Рентгенография выполнена в Ресурсном Центре СПбГУ «РДМИ».

[1] Бирюков Я.П., Бубнова Р.С. и др. // Тез. докл. «Inno-Tech 2015». 2015, с 13.

[2] Zhi-Jun Zhang, Teng-Teng Jin *et al.* // Inorg. Chem. 2015, 54 (3), p 969–975.

ПОДХОДЫ К ВЫРАЩИВАНИЮ МОНОКРИСТАЛЛОВ СМЕШАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СИСТЕМАХ С БОЛЬШОЙ РАЗНИЦЕЙ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ КРАЙНИХ ЧЛЕНОВ

Бочаров С.Н., Крючкова Л.Ю., Савельев С.О., Вихарев А.Е.
Институт наук о Земле, СПбГУ
e-mail: bocharovsergei@mail.ru

Смешанные кристаллы являются перспективными материалами для применения в различных областях, таких как оптические элементы, элементы рентгеновской оптики, детекторы излучений и т.д. Однако подходы к выращиванию крупных смешанных монокристаллов не учитывают особенностей протекания процессов в изоморфно-смешанных системах таких, как метасоматические реакции замещения, которые приводят к формированию в объеме кристалла областей, различающегося состава и, как следствие, блокованию, расщеплению и развитию трещин. Этот эффект особенно сильно проявляется для систем, крайние члены ряда которых имеет большую разницу параметров элементарной ячейки (Δ>0.3-0.4Å). Использование традиционных подходов к выращиванию монокристаллов в таких системах не позволяет получить крупные качественные кристаллы. Нами предложены подходы, позволяющие обойти эти ограничения и базирующиеся на следующих принципах. 1. Использование метода испарения растворителя при постоянной температуре. 2. Низкие величины движущей силы и нормальной скорости роста. 3. Перемешивание раствора со скоростями, обеспечивающими срыв диффузионного слоя. 4. Использование затравок максимально близких по составу к выращиваемому кристаллу. 5. Наличие в ростовой зоне спонтанно осажденных из маточного раствора кристаллов. Эти подходы были опробованы на системе ADP-KDP, в которой удалось получить не расщепленные кристаллы в растворах с содержанием KDP до 40 вес.%. Однако, выращенные кристаллы характеризуются трещиноватостью по нормали к L_4, что связано с различием коэффициентов распределения секторов роста призмы и пирамиды. Таким образом, необходимо введение дополнительно ограничения – выращивание кристалла одним сектором роста.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№16-29-11727).

САМООРГАНИЗАЦИЯ КИСЛОРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ТРЕУГОЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ TO_3

Бубнова Р.С.[1,2], Филатов С.К.[2]
[1] *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург*
[2] *Санкт-Петербургский государственный университет*
e-mail: rimma_bubnova@mail.ru

Тепловое движение является неотъемлемой движущей силой образования кристаллических веществ. В боратах, карбонатах и нитратах такой организующей силой являются термические вибрации атомов *T* и O в треугольниках TO_3 (*T* = B, C, N) предпочтительно перпендикулярно плоскости треугольников. Треугольники и жесткие B–O группы, содержащие такие треугольники, создают друг для друга наименьшие помехи, когда они занимают в кристаллической структуре параллельную (или предпочтительную) ориентировку (например, рис. 1). В частом проявлении сходной ориентировки треугольных радикалов и заключается основная черта самоорганизации TO_3-содержащих соединений. Даются примеры самоорганизации атомов, треугольников TO_3 и жестких борокислородных групп в процессе кристаллизации соединений [1].

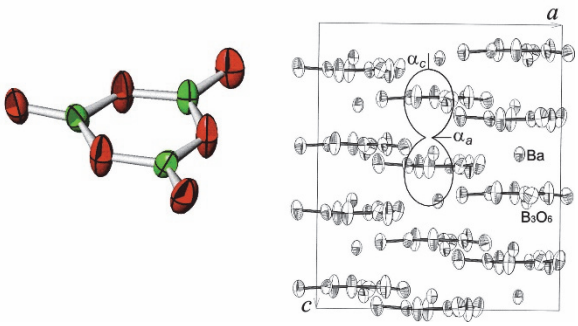


Рис. 1. Анизотропия термических колебаний атомов B *и* O *как движущая сила самоорганизации плоских триборатных групп (слева) в кристаллической структуре* β-BaB_2O_4 *(справа).*

Работа поддержана РФФИ, проект 15-03-05845.

[1] Bubnova R.S., Filatov S,K, // Struct. Chem., 2016, doi: 10.1007/s11224-016-0807-9.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПРИ ПОСЛОЙНОМ РОСТЕ ИЗ РАСПЛАВА

Бункин А.Ю., Гук В.Г., Папушина Т.И.
Уральский федеральный университет имени. первого Президента России Б.Н.Ельцина,
e-mail:bunkin@e1.ru

Проблемы получения расплавными методами массивных монокристаллов с высоким структурным совершенством в настоящее время остаются актуальными, в частности, в связи с растущими требованиями к качеству подложек для микроэлектронных приборов [1]. В настоящей работе на основе данных оптической и электронной микроскопии, рентгеновского микроанализа изучены процессы, приводящие в конце концов к потере устойчивости послойно растущей поверхности (способ Чохральского). Объекты исследования – ферроэлектрики молибдат гадолиния $Gd_2(MoO_4)_3$, германат свинца $Pb_5Ge_3O_{11}$, а также интерметаллические соединения Fe-Co-Ge. Показано, что, несмотря на существенные отличия в кристаллической структуре соединений, в вязкости их расплавов, в технологических параметрах процесса выращивания развитие явления потери устойчивости фронта происходит «по единому сценарию». В данном методе достаточно сложно поддерживать изотерму кристаллизации плоской или выпуклой в сторону расплава. При вогнутой же в сторону кристалла изотерме и торможении примесью входящего двугранного угла ступеней роста на фронте формируются макроскопические ступени, достигающие высоты в десятки атомных слоев. В роли примеси может выступать и избыток одного из компонентов расплава благодаря преимущественному испарению других.

Выявлено несколько вариантов дальнейшего развития процесса: а) движение макроступеней приводит к формированию расположенной под углом к оси роста слоистой неоднородности в распределении примеси; б) возможен распад макроступеней с «выстреливанием» нависающего слоя и захват плоских включений расплава, перпендикулярных оси роста; в) при наличии плотноупакованных плоскостей, ориентированных под углом к поверхности раздела фаз, жидкие включения наклонены таким же образом к этой поверхности. На окончательное распределение дефектов в выращенном кристалле оказывают влияние процессы миграции и затвердевания захваченных включений. Экспериментально выявлено, что управление конвективными потоками в расплаве позволяет подавить процесс потери устойчивости и обеспечить высокое структурное совершенство монокристаллов.

[1] Zharikov E.V. Problems and recent advantages in melt growth technology. // J. Cryst. Growth, 2012, v.360, p.146 – 154.

ВАРИАЦИЯ ДЛИН СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКЕ MNGE С ТЕМПЕРАТУРОЙ И ДАВЛЕНИЕМ

Вальковский Г.А.[1], Яшина Е.Г.[2], Цвященко А.В[3], Григорьев С.В.[1,2]
[1] *Санкт-Петербургский Государственный Университет*
[2] *Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ КИ*
[3] *Институт физики высоких давлений*
e-mail: Valkovsky_Gleb@mail.ru

Одним из самых больших вызовов современной физики конденсированного состояния является исследование сильно коррелированных систем, таких как кондо-изоляторы и системы с переменной валентностью, например, на основе редкоземельных элементов. Много открытых вопросов есть ещё в области экзотических магнетиков на основе переходных металлов группы железа и элементов четвёртой группы (Si, Ge), в частности непонятным остаётся нефермижидкостное поведение MnSi (структурный тип B20) под давлением. В ряду изоструктурных магнетиков MnGe является ещё более уникальным, для него наблюдается часто реализуемое в сильно коррелированных системах фазовое расслоение – магнитный фазовый переход сопровождается формированием ферромагнитных “капель” в парамагнитной матрице [1]. Кроме того, MnGe характеризуется аномальным температурным поведением длин связей в области магнитного фазового перехода, спиновыми переходами под давлением и отрицательным коэффициентом теплового расширения под давлением, что показано в настоящей работе. Полученные результаты свидетельствуют о значительных анизотропных изменениях кристаллической решётки с температурой и давлением, при неизменной симметрии пространственной группы. Такое поведение, возможно, обусловлено сильными электронными корреляциями.

[1] Altynbaev E., Siegfried S.-A. et al. // Phys. Rev. B, 2014, 90, 174420.

ФОРМИРОВАНИЕ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $Ti_xZr_{1-x}O_2$ ($0 \le x < 0,4$) С МОНОКЛИННОЙ СТРУКТУРОЙ В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Василевская А.К.[1], Альмяшева О.В.[2]
[1] ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН
[2] СПбГЭТУ «ЛЭТИ»
e-mail: a.k.vasilevskaya@gmail.com

Равновесные фазовые диаграммы ZrO_2-TiO_2 не описывают область ниже 500°C [1, 2]. Однако, формирование в низкотемпературной области кристаллических наночастиц в системе ZrO_2-TiO_2 было показано экспериментально [3, 4]. В настоящей работе нанокристаллические композиты с соотношение Zr/Ti от 0 до 1 получены из соосажденых гидроксидов при 240-300°C в гидротермальных условиях. Процедура синтеза подробно описана в работе [4].

Установлено, что структурное подобие частиц-предшественников и кристаллов образующейся фазы определяет процессы формирования новой фазы в низкотемпературной области в системе ZrO_2-TiO_2. По этой причине в рентгено-аморфных соосажденных композициях формируются метастабильные фазы со структурой аналогичной структуре предзародышевых кластеров. В том числе, в рассмотренных условиях формируется твердый раствор диоксида циркония с тетрагональной структурой (*t*-ZrO_2), высокотемпературная разупорядоченная модификация соединения $ZrTiO_4$ и твердый раствор диоксида титана со структурой анатаза. Увеличение изотермической выдержки приводит к распаду метастабильных фаз *t*-ZrO_2 и $ZrTiO_4$ с образованием твердых растворов со структурой моноклинного диоксида циркония (*m*-ZrO_2) и анатаза. На основании зависимости параметров *m*-ZrO_2 от содержания TiO_2 в системе определен предел растворимости TiO_2 в *m*-ZrO_2, которая составила ~ 40 мол. %, что существенно выше, чем при твердофазном синтезе на воздухе при температуре превышающей 1000°C. Анализ порошковых рентгеновских дифрактограмм показал, что катионное замещение в $Ti_xZr_{1-x}O_2$ носит упорядоченный характер.

[1] McHale A., Roth R. // J. Am. Ceram. Soc., 1986, том 69, № 11, с. 827–832.
[2] Troitzsch U., Ellis D. // Mater. Sci., 2005, том 45, № 17, с. 4571–4577.
[3] Wang X.M., Xiao P. // Mater. Res., 2006, том 21, № 2, с. 355–368.
[4] Василевская А.К. , Альмяшева О. В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2012, том 3, № 4, с. 75–81.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МИКРОСТРУКТУР КРИСТАЛЛОВ KDP

Васильев А.Б., Березкин В.В., Артемов В.В.
Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»
e-mail: vasiliev51@mail.ru

Ранее на примере пересыщенного раствора йодноватой кислоты (HIO_3) с использованием принудительного течения пересыщенного кристаллизационного раствора через трековую мембрану на ее поверхности были получены игольчатые микрокристаллы [1]. Было показано, что выращенные микрокристаллы имеют ограненную форму, поперечные размеры и направления преимущественного роста, соответствующие диаметрам и направлению пор используемой трековой мембраны.

Работа посвящена формированию на трековых мембранах ориентированных микроструктур дигидрофосфата калия (KDP). Выращивание микрокристаллов проводилось в фильтрационной ячейке. Использовалась трековая мембрана из полиэтилентерефталата (ПЭТФ) с диаметром пор 110 нм и плотностью пор $1.2 \cdot 10^8$ см$^{-2}$ Проведенные исследования показали, что микрокристаллизация KDP происходила на стенках и в объеме пор (Рис.1). Ее отсутствие на поверхности мембраны, по-видимому, обусловлено меньшей площадью контакта по сравнению с развитой поверхностью пор. Было подтверждено преимущество разработанного и используемого метода для формирования игольчатых кристаллических микроструктур из водных растворов: универсальность методики и простота оборудования. Разработанные острийные структуры могут найти применение в системах оптической и ультразвуковой техники.

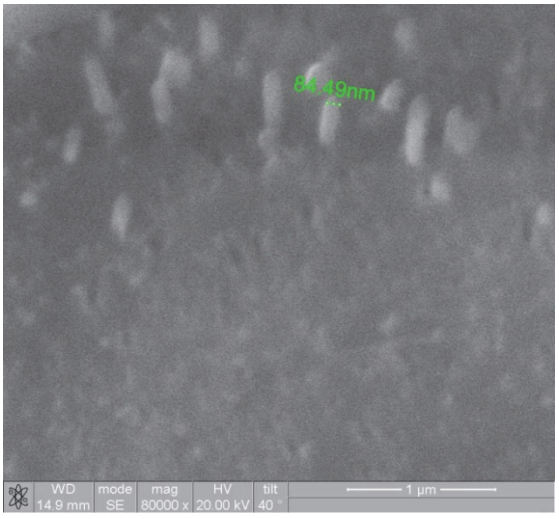


Рис.1 Фотография микрокристаллов KDP на поверхности трековой мембраны.

[1] А.Б. Васильев, В.В. Березкин, В.В. Артемов, Б.В. Мчедлишвили. Применение трековых мембран для синтеза микрокристаллических диэлектрических структур.// Мембраны и мембранные технологии. 2015. Т.5. №2, С. 120-124.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА КОЛЛОИДНЫХ КВАЗИДВУМЕРНЫХ НАНОПЛАСТИНОК CdSe ТОЛЩИНОЙ 1.2 НМ

Васильев Р.Б., Шлёнская Н.Н., Карлова Д.А.,
Козловский В.Ф., Лебедев А.И., Случинская И.А.
Московский государственный университет
e-mail: romvas@inorg.chem.msu.ru

Квазидвумерные нанопластинки халькогенидов кадмия в последнее время вызывают большой интерес благодаря рекордно узким полосам поглощения и люминесценции, делающих их перспективными для создания различных оптоэлектронных устройств. В настоящей работе изучена структура ранее не описанной в литературе сверхтонкой (1.2 нм) популяции квазидвумерных наночастиц CdSe.

Наночастицы получали коллоидным методом в октадецене в инертной атмосфере с использованием ацетата кадмия при 130ºС. В спектрах поглощения наночастиц наблюдаются узкие полосы, отвечающие переходам между подзонами легких и тяжелых дырок и зоной проводимости. Положение нижней по энергии полосы (396 нм) позволяет оценить толщину нанопластинки в 1.2 нм.

Квазидвумерная морфология нанопластинок была подтверждена методом ПЭМ. Наночастицы имели прямоугольную форму с латеральными размерами 100–200 нм и были свернуты в рулоны диаметром 30–40 нм. По данным рентгеновской дифракции наночастицы имели структуру сфалерита, причем ширина рефлексов, отвечающих плоскостям, лежащим в плоскости слоев и под углом к ним, была различной.

Исследование нанопластинок методом EXAFS-спектроскопии на *K*-крае Se на источнике синхротронного излучения BESSY показало, что расстояния Se-Cd и Se-Se и соответствующие факторы Дебая-Уоллера хорошо согласуются с данными для объемного CdSe, что свидетельствует о высоком структурном совершенстве нанопластинок. Кроме того, было определено положение атомов кислорода карбоксильных групп в слое лигандов на поверхности наночастиц.

Моделирование структуры нанопластинок из первых принципов обнаружило локальные искажения структуры, вызванные атомами О. Рассчитанные межатомные расстояния хорошо согласуются с найденными в эксперименте.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 16-03-00704 и 16-29-11694.

ОСОБЕННОСТИ РОСТА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ В СИСТЕМЕ $K_2(Co,Ni)(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$

Васильева Н.А., Григорьева М.С., Гребенев В.В.,
Антипин А.М., Сорокина Н.И., Нуждин Д.С.,
Волошин А.Э.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
Natalie5590@mail.ru

На примере системы $K_2(Co,Ni)(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ были исследованы процессы образования кристаллов при росте из водных смешанных растворов методом понижения температуры раствора и при жидкофазной эпитаксии. Кроме того, были изучены свойства кристаллов и процессы дефектообразования. Были измерены изотермы совместной растворимости сульфата калия кобальта и сульфата калия никеля в воде. Был построен график зависимости состава смешанного кристалла от состава маточного раствора. Дефектная структура выращенных смешанных монокристаллов $K_2Ni_xCo_{(1-x)}(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCNSH) и выращенных эпитаксиальных композиций была изучена с помощью энергодисперсионного анализа, рентгеноструктурного анализа, метода рентгеновской топографии и атомно-эмиссионного анализа. По данным оптического исследования смешанных монокристаллов было установлено, что $K_2Ni_xCo_{(1-x)}(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ кристаллы могут быть использованы в качестве УФ-фильтров в солнечно слепой технологии.

Была выращена серия бикристаллических $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCSH) композиций (20 × 30 × 20 мм) на подложках $K_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KNSH) (10 × 10 × 10 мм) при различных условиях (пересыщениях маточного раствора). Оптически однородные, крупные (15 × 15 × 20 мм) смешанные монокристаллы KCNSH были впервые выращены из растворов с различным соотношением изоморфных компонентов KCSH: KNSH в маточном растворе в статическом (без перемешивания раствора) и динамическом (с непрерывным перемешиванием раствора) режимах [1]. Выращенные смешанные кристаллы KCNSH имеют более высокий коэффициент пропускания в УФ-области (около 80% при длине волны 295 нм), чем бикристаллические композиции. Согласно рентгеноструктурному анализу было установлено, что замещение в структуре KCSH атомов кобальта на атомы никеля не приводит к каким-либо изменениям в окружении катионов калия и серы. Однако с увеличением концентрации Ni в структуре значение расстояния (Co, Ni) - O2 уменьшается в меньшей степени, чем значение расстояния (Co, Ni) - O1 и (Co, Ni) - O3, и в результате CoO6 многогранники - более искаженные октаэдры, чем NiO6-октаэдры [2]. Все выращенные монокристаллы имеют хорошо выраженную зональность и секториальность, характерную для роста кристаллов из раствора. Согласно атомно-эмиссионному спектральному анализу различие в содержании кобальта в секторах роста (001) и (110) достигает 8%. Кроме того, с помощью энергодисперсионного анализа была обнаружена мозаичная неоднородность в кристаллах KCNSH [3]. Типичный размер мозаики варьируется в диапазоне 70-200 мкм. Исследования дефектообразования в эпитаксиальных композициях проводились с помощью энергодисперсионного анализа и метода рентгеновской топографии. На межфазовой границе было обнаружено большое количество дефектов: многочисленные включения плотностью ~ $5 \cdot 10^5$ см$^{-2}$ и пучки дислокаций, перпендикулярные границе раздела фаз, плотность которых можно оценить на уровне 10^5-10^6 см$^{-2}$. Эти процессы дефектообразования на межфазовой границе в эпитаксиальных композициях и на секторных границах в монокристаллах имеют один и тот же характер, следствием которых являются включения и напряжения в кристаллах.

Исследования структуры монокристаллов KCNSH с помощью рентгеноструктурного и энергодисперсионного анализов были проведены за счет российского научного фонда (проект № 15-12-00030).

[1] Васильева Н.А., Григорьева М.С., Гребенев В.В., Волошин А.Э. // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 630.

[2] Васильева Н.А., Сорокина Н.И., Антипин А.М., Верин И.А., Волошин А.Э. // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 1. С. 16.

[3] Григорьева М.С., Васильева Н.А., Артемов В.В., Волошин А.Э. // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 2. С. 316.

МЕТРОЛОГИЯ СОСТАВА ТРОЙНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $AL_XGA_{1-X}AS$ И $IN_YGA_{1-Y}AS$ В ТЕХНОЛОГИИ PHEMT ГЕТЕРОСТРУКТУР

Васильевский И.С.[1], Виниченко А.Н.[1], Сарайкин В.В.[2], Грехов М.М.[1]

[1] НИЯУ МИФИ

[2] ФГБУН ИСВЧПЭ РАН

e-mail: ivasilevskii@mail.ru

Современные PHEMT наногетероструктуры с квантовой ямой (КЯ) $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ - один из основных функциональных материалов СВЧ электроники, важнейшей задачей их метрологии является определение состава и толщины активных слоев структуры. В настоящей работе проведено сравнение абсолютных значений состава слоев $Al_xGa_{1-x}As$ и $In_yGa_{1-y}As$ (x=0,15÷0,25, y~0,20) методами двухкристалльной рентгеновской дифрактометрии (РД), резерфордовского обратного рассеяния (РОР), вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС), сопоставление с данными спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ). Были использованы как тестовые образцы с толстым слоем $Al_xGa_{1-x}As$ однородного состава, так и специально разработанные комбинированные образцы $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As$, и наконец, PHEMT гетероструктуры. Абсолютный состав измерялся методом РОР и ВИМС в режиме регистрации комплексных ионов $MeCs^+$, который устраняет различия коэффициента ионизации. Получено хорошее согласие результатов измерений. Методом РД определена воспроизводимость параметров партии PHEMT.

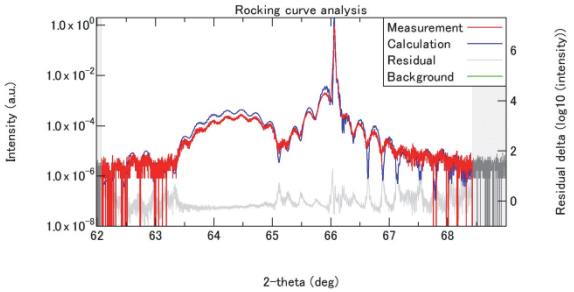


Рис.1. РД отражения (004) PHEMT структуры – эксперимент и теоретическая модель.

Дополнительную точность определения параметров PHEMT обеспечивает подгонка тонкой структуры побочных максимумов и совпадение фаз маятниковых осцилляций при решении обратной задачи РД. Спектроскопия ФЛ PHEMT структур дает информацию о параметрах КЯ $In_yGa_{1-y}As$, а также о сверхрешетке AlGaAs/GaAs. Положение переходов в КЯ несет одовременно информацию о ширине КЯ и составе материала КЯ, которые не является независимым при МЛЭ росте, поскольку флуктуация скорости роста компонент дает вклад как в состав, так и в скорость роста тройного соединения. В КЯ чувствительность положения пиков ФЛ к вариации состава возрастает в сравнении с объемным материалом.

ГИДРОДИНАМИКА РАСТВОРА ПРИ СКОРОСТНОМ РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ KDP

Верезуб Н.А.[1], Волошин А.Э.[2], Простомолотов А.И.[1]

[1]ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: prosto@ipmnet.ru

Устойчивый скоростной рост кристаллов KDP по механизму двумерного зарождения является актуальной задачей и обусловливает разработку новых ростовых устройств. Это инициирует решение новых задач гидродинамики и массообмена в водных растворах, характеризующихся трехмерностью контейнера и каналов подачи и слива раствора, сложной геометрией кристалла и его положением в объеме раствора, наличием вращающихся устройств для интенсификации перемешивания, причем рост кристалла рассматривается в сопряженной постановке как массообмен в системе «раствор-кристалл». В данной работе с помощью средств математического моделирования [1] рассматривается одно из таких перспективных устройств, показанное на Рис. 1а. Его действие следующее: в контейнер – *1* раствор закачивается с большой скоростью через боковой наклонный патрубок – *2* и, обтекая кристалл – *3,* опускается вниз и сливается через отверстие в центре дна контейнера. Направление струйного втекания раствора из патрубка регулируется его пространственным креплением к контейнеру, и углами наклона к пространственным осям. Как показано на Рис. 1б, при достаточно сильном втекании (~ 0.6 м/с) поток, обтекая кристалл, имеющий в данном случае кубическую форму, после достижения стенки контейнера, несколько закручиваясь, опускается вниз и вытекает через отверстие в центре дна контейнера. Пространственный характер течения, формы и расположения кристалла создают неодинаковые условия массообмена на поверхностях растущего кристалла. Результаты проведенного моделирования позволили оптимизировать гидродинамику раствора в данной конструкции с учетом технологических условий и критериев двумерного зарождения [2].

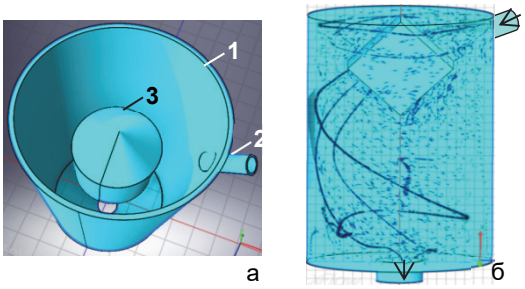


Рис.1. Схема устройства – а и траектории течения раствора в контейнере с кристаллом кубической формы – б.

[1] Prostomolotov A., Ilyasov H., Verezub N. // Science and Technology, 2013, vol. 3, no. 2A, p. 18-25.

[2] Волошин А.Э., Рашкович Л.Н., Руднева Е.Б., Маноменова В.Л. // Природа, 2014, № 10, с. 62-72.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛАХ Na(Cl, Br)O_3, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗНЫМИ МЕТОДАМИ

Вихарев А.Е., Бочаров С.Н.
Санкт-Петербургский Государственный Университет
e-mail: alexvikev@gmail.com

Исследование образования смешанных кристаллов является перспективным направлением материаловедения. Характерной особенностью смешанных кристаллов является неоднородное распределение компонентов по кристаллу как в макромасштабе (зоны, сектора), так и в микромасштабе (микрокластерная неоднородность), что приводит к неравномерному изменению их свойств по объему. Из литературы известно, что коэффициентов распределения компонентов изменяются с изменением температуры немонотонно (эффект «кинетических аномалий»), что в случае смешанных кристаллов приводит к формированию зональности и должно учитываться при выращивании крупных монокристаллов. Поэтому нами было изучено распределение компонентов в смешанных кристаллах в зависимости от метода выращивания. В качестве модельной выбрана система $NaClO_3$ – $NaBrO_3$, для которой известна зависимость коэффициентов распределения от температуры. Кристаллы были получены тремя методами: методом температурного градиента со снижением температуры, методом микрокристаллизации при постоянных условиях и методом массовой кристаллизации. Исследования распределения компонентов было проведено методом рентгеновской томографии. Полученные кристаллы характеризуются различным распределением компонентов. В кристаллах, выращенных при изменении температуры, выявлена предсказанная в литературе зональность. Внутренняя (затравочная) и внешняя, однородная зоны, проявлены в кристаллах, полученных методом микрокристалдлизации. Для кристаллов, полученных методом массовой кристаллизации характерно доменное распределение компонентов. Таким образом, выращивание смешанных кристаллов при постоянной температуре обеспечивает наиболее однородное распределение компонентов в объеме кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-29-1172-офи_м.

СТРУКТУРНАЯ МОДУЛЯЦИЯ В СИСТЕМЕ $Sr_3B_2SiO_8$–$Sr_2B_2O_5$

Волков С.Н.[1], Дьюшек М.[2], Бубнова Р.С.[1,3], Кржижановская М.Г.[3], Болотина Н.Б.[4], Филатов С.К.[3], Белоусова О.Л.[1]
[1] *Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,*
[2] *Институт физики Чешской академии наук*
[3] *Санкт-Петербургский государственный университет*
[4] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: s.n.volkov@inbox.ru

Кристаллическая структура пиробората стронция $Sr_2B_2O_5$ образована параллельными друг другу группами B_2O_5. Эти группы состоят из двух связанных через общую вершину борокислородных треугольников BO_3. Взаимная ориентировка борокислородных треугольников в этих группах может меняться в широких пределах. При нагревании они меняют свою ориентировку и происходят полиморфные переходы $\gamma \leftrightarrow \beta \leftrightarrow \alpha' \leftrightarrow \alpha$ типа «порядок-беспорядок» с формированием двукратной (фаза γ) и шестикратной (фаза β) сверхструктур (рис. 1). Структура $Sr_2B_2O_5$ близка структуре боросиликата $Sr_3B_2SiO_8$ [1], которая образована разупорядоченными группами B_2SiO_8. Несоразмерно-модулированные твердые растворы $Sr_3B_{2+x}Si_{1-x}O_{8-x/2}$ [2] формируются в системе $Sr_3B_2SiO_8$–$Sr_2B_2O_5$. Причиной формирования модулированных фаз является чередование Si-обогащенных и B-обогащенных доменов, что сопровождается деформацией групп B_2O_5 и B_2SiO_8 по аналогии с тем, как это происходит в структурах модификаций $Sr_2B_2O_5$.

Исследования выполнялись в рамках бюджетной темы РФФИ 15–03–05845. Рентгеновские эксперименты выполнены в ресурсном центре СПбГУ «Рентгендифракционные методы исследования»

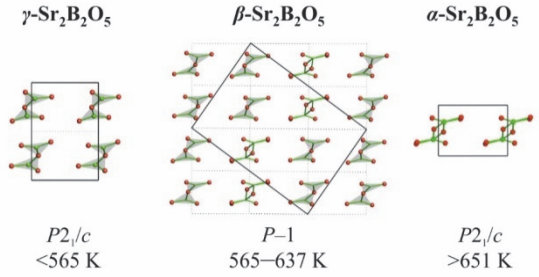


Рис.1. Кристаллические структуры модификаций $Sr_2B_2O_5$.

[1] Krzhizhanovskaya, M. G. Synthesis, crystal structure and thermal behavior of $Sr_3B_2SiO_8$ borosilicate / M. G. Krzhizhanovskaya [et al.] // J. Solid St. Chem. – 2010. – Vol. 183. – P. 2352–2357.

[2] Volkov, S. Incommensurate modulation and thermal expansion of $Sr_3B_{2+x}Si_{1-x}O_{8-x/2}$ solid solutions / Volkov, S. [et al.] // Acta Crystallogr.–2015.–B71.–P. 489–497.

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНУЮ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ MNSI

Волков А.Г., Повзнер А.А., Ясюлевич И.А.
ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
e-mail: i.a.yasyulevich@urfu.ru

MnSi с кристаллической структурой B20 в основном состоянии является ферромагнитным длиннопериодическим геликоидом [1,2]. Причиной формирования геликоидальной длиннопериодической спиновой структуры является конкуренция релятивистского антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мории и неоднородного обменного взаимодействия [1]. Температура Нееля (T_N) MnSi составляет 29K при атмосферном давлении и уменьшается практически до нуля при увеличении давления до 15kbar. В связи с отсутствием до настоящего времени уравнения состояния геликоидального ферромагнетика, учитывающего спин-флуктуационные эффекты, а также расчетов электронной структуры этого соединения при различных давлениях теоретический анализ магнитной диаграммы MnSi для различных давлений и температур все еще отсутствует.

В рамках LDA+U-модели дополненной учетом релятивистского антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мории проведен анализ влияния давления на T_N и температурную зависимость магнитной восприимчивости геликоидального ферромагнетика MnSi. Показано, что уровень Ферми находится в области локального минимума DOS. Это обусловливает неустойчивость магнитных решений и возникновение больших по амплитуде нулевых спиновых флуктуаций, имитирующих картину локальных магнитных моментов. Усиление температурно обусловленных спин-флуктуационных эффектов с увеличением давления ведет к понижению значения T_N. В результате при давлениях больше 14.45kbar нулевые флуктуации сохраняются выше T_N. После исчезновения геликоидального ферромагнетизма, возникает парамагнитное состояние, в котором с увеличением температуры имеет место эффект резкого подавления локальных магнитных моментов.

[1] Bak P., Jensen M.H. // J. Phys., 1980, том C 13, с L881-L885.

[2] Стишов С.М., Перова А.Е.. // УФН, 2011, 181, с 1157-1170.

СИНТЕЗ И ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НОВОГО ОКСОФОСФАТА ВИСМУТА $Bi_3(PO_4)O_3$

Волков А.С.[1], Ямнова Н.А.[1], Аксенов С.М.[2], Боровикова Е.Ю.[1], Гурбанова О.А.[1], Димитрова О.В.[1]
[1] МГУ имени М.В. Ломоносова
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: aks.crys@gmail.com

Интерес к синтезу и исследованию новых висмут содержащих оксидов и оксосолей неорганических кислот, таких как фосфаты, арсенаты, ванадаты и т.п., обусловлен особенностями их строения, которые, в свою очередь, определяют физические, в частности ионно-проводящие свойства.

Методом гидротермального синтеза в системе Bi_2O_3 : NiO : K_2O : P_2O_5 (соотношение компонент 1:1:1:1; pH=6-7; T=690-700 K) нами получены кристаллы желтого цвета, принадлежащие новой фазе состава $Bi_3(PO_4)O_3$. Кристаллическая структура изучена методом рентгеноструктурного анализа с использованием дифрактометра SMART APEX II (CCD-детектор). Параметры триклинной ячейки: a=5.6840(6) Å, b=7.0334(7) Å, c=9.1578(9) Å, α=78.958(2)°, β=77.858(2)°, γ=68.992(2)°; V=331.41(6) Å^3; пр. гр. $P\bar{1}$. Структура уточнена до итогового R=4.41% [1445 $I > 2\sigma(I)$].

В кристаллической структуре $Bi_3(PO_4)O_3$ присутствуют крупные семи- и восьмивершинники висмута, связаные через общие ребра в широкий плотный слои, параллельный (001). Слои объединяются с изолированными PO_4-тетраэдрами, формируя гетерополиэдрический квазикаркас. Основываясь на принципах анионоцентрированной кристаллохимии [1] в структуре $Bi_3(PO_4)O_3$ можно выделить три атомами кислорода, которые центрируют два тетраэдра, а также один треугольник, в вершинах которых расположены атомы Bi. $[OBi_4]$-тетраэдры и $[OBi_3]$-треугольники связаны в параллельные (001) слои состава $[O_3Bi_3]^{3+}$, которые вдоль оси ***c*** чередуются с изолированными $(PO_4)^{3-}$-тетраэдрами, расположенными в межслоевом пространстве (рис. 1).

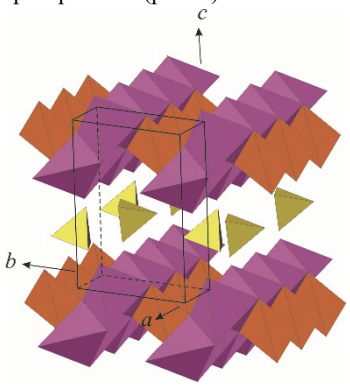


Рис. 1. Кристаллическая структура $Bi_3(PO_4)O_3$.

[1] *Krivovichev S.V., Mentre O., Siidra, O.I., et al.* // Chem. Rev., 2013, vol 113, p 6459−6535.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента МК 7926.2016.5.

РЕНТГЕНОТОПОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ KDP, ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ПЕРЕСЫЩЕНИИ

Волошин А.Э., Баскакова С.С., Руднева Е.Б.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: labsol@yandex.ru

Методом рентгеновской топографии исследованы кристаллы, выращенные при пересыщениях $\sigma=\ln(c/c_0)$ от 0.22 до 0.47. В интервале пересыщений от 0.22 до 0.34 фиксируется зонарность морфологического типа, при пересыщениях 0.44-0.47 происходит качественное изменение дефектной структуры кристаллов: реализуется зонарность кинетического типа (полосы роста непрерывны вдоль всей поверхности кристалла), при этом дифракционные изображения полос роста и секториальных границ сильно ослаблены по сравнению со случаем роста по дислокационно-спиральному механизму. В случае равномерной регенерации затравки кристалл растет практически бездефектным. Эти изменения связываются с реализацией роста кристаллов по механизму двумерного зародышеобразования. Расчет кинетических кривых роста кристалла KDP показывает, что при наличии дислокаций преобладание механизма двумерного (2D) зарождения над дислокационно-спиральным ростом возможно при пересыщении выше 0.26 для граней {100} и выше 0.44 для граней {101}. Экспериментальные значения скоростей роста хорошо согласуются с теоретическими.

Предполагается, что при росте по механизму двумерного зарождения возможно выращивание кристаллов высокого структурного совершенства при создании условий, обеспечивающих их стабильный рост.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-29-11785 офи-м).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФИЗИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ CDTE, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ОБРЕИМОВА-ШУБНИКОВА.

Волчков И.С., Ополченцев А.М., Колымагин А.Б., Павлюк М.Д., Каневский В.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ИК им. А.В.Шубникова

В работе исследовалось воздействие импульсного магнитного поля (ИМП) на объемные монокристаллы CdTe, выращенные методом Обреимова-Шубникова. CdTe представляет интерес в качестве материала для ИК-детекторов, элементов солнечных батарей, а также в качестве чувствительных элементов детекторов рентгеновского и γ-излучения. Актуальной задачей является улучшение свойств CdTe. Известно, что слабое (<1 Тл) импульсное магнитное поле оказывает воздействие на реальную структуру твердых тел[1,2].

Проводились исследования воздействия ИМП на электрические и физические характеристики CdTe. Анализировались изменения электропроводности CdTe, а также проводились измерения изменения микротвердости и упругости CdTe во времени. Полученные результаты сравнивались с результатами контрольной группы образцов, которая не была подвержена воздействию ИМП.

ИМП, воздействующее на исследуемые образцы, имело следующие характеристики: Частота поля f = 12 Гц, величина магнитной индукции в точке макс. 480 мТл, длительностью $t = 8\cdot10^{-5}$s, длительность воздействия ИМП составило 10 мин.

В докладе обсуждается влияние ИМП на физические и электрические характеристики монокристаллов CdTe. Работа выполнена с использованием оборудования лаб. роста тонких пленок и неорг. наноструктур ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН ИК им. А.В.Шубникова, и ЦКП ИК РАН: санирующий нанотвердомер «НаноСкан-3D».

[1] Г.И. Дистлер, В.М. Каневский, В.В. Москвин. «О влиянии слабого импульсного магнитного поля на реальную структуру твердых тел» / ДАН СССР 268, 3, 591 (1983)

[2] М.Н. Левин, Г.В.Семенова, Т.П.Сушкова. «Влияние импульсного поля на реальную структуру твердых растворов в системе Sb-As» / ФТТ, 2003, т. 45, вып. 4

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ЛЬДА В РАСТВОРАХ AFP-III

Воронцов Д.А.[1], Титаева Е.К.[1], Сазаки Г.[2], Нагашима К.[2], Фурукава Ё.[2]

[1] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

[2] Институт низких температур

e-mail: vorontsovda@mail.ru

Известно, что некоторые организмы (морские рыбы, насекомые) могут вырабатывать антифриз-протеины (AFP), которые подавляют рекристаллизацию льда и способствуют сохранению жизнедеятельности при отрицательных температурах. Интерес к свойствам AFP обусловлен перспективами их применения в пищевой промышленности, медицине, биологии, микроэлектронике в связи с возможностью управлять кристаллизацией льда.

Цель работы – изучить как AFP-III, экстрагированный из рыб, влияет на морфологию и кинетику роста кристаллов льда и выяснить механизмы воздействия AFP-III.

Кристаллы льда гексагональной модификации выращивались в водных растворах AFP-III с концентрацией 0-800 мкг/мл. Скорости роста измерялись на оптическом микроскопе и интерферометре Маха-Цандера. В присутствии AFP-III вместо округлой атомно-шероховатой поверхности, растущей в кристаллографическом направлении *a*, появляются грани призмы, на гранях пинакоида образуются макроступени. По мере увеличения переохлаждения и концентрации протеина форма роста кристалла преобразуется от дисковой к планарным дендритам и скелетным формам. AFP-III блокирует рост граней призмы и увеличивает скорость роста пинакоида. Существует критическое переохлаждение, выше которого скорость роста дендритов в направлении *a* становится больше, чем в чистой воде. По данным конфокальной флуоресцентной микроскопии определено среднее расстояние между адсорбированными на гранях призмы молекулами протеина. Величина термогистерезиса, рассчитанная на основе уравнения Гиббса-Томсона, согласуется с экспериментальными значениями при допущении модели, учитывающей понижение свободной поверхностной энергии граней кристалла в растворах AFP-III.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-32-00014).

НОВЫЙ ПОДХОД К КЛАССИФИКАЦИИ НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ВИДА AB

Гажулина А.П., Марычев М.О.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

e-mail: asyagazhulina@yandex.ru

В исследовании рассмотрено 340 нецентросимметричных кристаллов вида *AB*. Впервые для этих кристаллов проведен полный анализ псевдосимметрических особенностей по отношению к операции инверсии. Предложен новый подход к классификации нецентросимметричных соединений вида *AB* [1]. В рамках введенного подхода структура кристаллов характеризуется дополнительными параметрами элементарной ячейки – набором центров псевдоинверсии. Установлено, что по псевдосимметрическим особенностям кристаллы вида *AB* можно разделить на три группы (включающие 174, 45 и 121 структуру), что обусловлено наличием или отсутствием характерной совокупности центров псевдоинверсии в каждой группе. В рамках модели точечных атомов для кристаллов первой и второй групп получена нижняя граница максимальных значений псевдоинверсии: $\eta^{I}* = 0.8$ и $\eta^{II}* = 0.5$. Расчеты псевдосимметрии [2] проведены с использованием программного пакета *PseudoSymmetry* [3].

В работе [4] показано, что степень псевдосимметрии, используемая в качестве количественной характеристики атомных структур кристаллов, может быть полезной характеристикой для установления корреляций между структурными особенностями кристаллов и их оптическими свойствами. Поэтому можно предположить, что полученные в данной работе кристаллографические результаты будут полезны для исследования других свойств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00536 мол_а.

[1] Gazhulina A.P., Marychev M.O. // J. Solid State Chem., 2016, V. 239, P. 170-177.

[2] Chuprunov E.V. // Crystallogr. Rep., 2007, V. 52, P. 1-11.

[3] Somov N.V., Chuprunov E.V. // Crystallogr. Rep., 2014, V. 59, P. 137-139.

[4] Gazhulina A.P., Marychev M.O. // J. Alloy. Compd., 2015, V. 623, P. 413-437.

НЕЛИНЕЙНЫЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ МАССОПЕРЕНОСЕ В ОБЪЕМЕ ЖИДКОЙ ФАЗЫ В УСЛОВИЯХ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО КРИСТАЛЛА

Гершанов В.Ю., Гармашов С.И.
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»
e-mail: garmashov@sfedu.ru

Рассмотрены особенности массопереноса в жидкой фазе в полости отрицательного кристалла при стационарных и нестационарных тепловых условиях, и отличном от нуля градиенте температуры. Массоперенос в жидкой фазе определяется нелинейной межфазной кинетикой и межфазной поверхностной энергией, а также их анизотропией. При наличии колебаний температуры это обусловливает возникновение нелинейных нестационарных эффектов, которые позволяют управлять массопереносом в широких пределах

Для демонстрации влияния нелинейных нестационарных эффектов на массоперенос может быть использована диаграммная техника, основанная на Лемме [1] о скорости перемещения плоской прослойки жидкой фазы, заключенной между двумя кристаллическими пластинами, при постоянной скорости изменения температуры межфазных границ.

Один из эффектов заключается в ослаблении или полном снятии влияния межфазных ограничений [2] на массоперенос (смене лимитирующей стадии массопереноса) под воздействием небольших (с амплитудой порядка сотых долей градуса) колебаний температуры. Этот эффект может использован для обеспечения миграции отрицательного кристалла, движение которого в стационарных тепловых условиях в принципе невозможно при сильных межфазных ограничениях. Другой демонстрируемый нестационарный эффект состоит в переключении диффузионных потоков [3] между сингулярными и несингулярными участками межфазной границы. С помощью этого эффекта оказывается возможным обеспечить управление формой отрицательного кристалла за счет изменения формы колебаний температуры.

[1] Gershanov V.Yu., Garmashov S.I. // J. Cryst. Growth, 2009, vol. 311, p 2722-2730.

[2] Гершанов В.Ю., Гармашов С.И. // Кристаллография, 1992, том 37, № 1, с 34-42.

[3] Гершанов В.Ю., Гармашов С.И. и др. // Кристаллография, 2000, том 45, № 3, с 568-572.

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ $MnGa_4$ И $CrGa_4$

Гиппиус А.А.[1,2], Охотников К.С.[3], Журенко С.В.[1], Верченко В.Ю.[4], Шевельков А.В.[4]
[1]МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет
[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3]НИЦООО РобоСиВи
[4]МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет
e-mail: gippius@mail.ru

Соединения с кубической кристаллической структурой типа $PtHg_4$ демонстрируют необычные химические связи и различные термодинамические свойства: в то время как $CrGa_4$ является плохим немагнитным металлом, $MnGa_4$ является антиферромагнетиком. Поликристаллические однофазные образцы $MnGa_4$ и $CrGa_4$ были синтезированы методом стандартного ампульного синтеза. Данные рентгеноструктурного анализа показывают, что обе системы характеризуются кубической кристаллографической ячейкой размером a=5.6497 Å ($CrGa_4$) и a=5.5967 Å ($MnGa_4$) и пространственной группой Im-3m. Атомы находятся в частных позициях: Mn/Cr (0,0,0) и Ga (¼, ¼, ¼).

Были проведены исследования методом ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) на ядрах ^{69,71}Ga при T=4.2 K. Данные эксперименты показали качественное различие локального окружения атома Ga в исследуемых соединениях (Рис. 1а). В системе $MnGa_4$ наблюдается ЯКР спектр, состоящий из узкой одиночной линии Лоренцевой формы. Зеемановское расщепление отсутствует, поскольку вследствие симметричного расположения атомов Ga относительно магнитных атомов Mn наведенное магнитное поле в позиции Ga равно 0.

Спектр $CrGa_4$, напротив, характеризуется сложной сателлитной структурой. Данная структура однозначно свидетельствует об отклонении системы от симметрии, предсказанной рентгеноструктурным анализом. Наиболее вероятная причина – смещение атома хрома из симметричной позиции для снятия вырождения орбиталей (эффект Яна-Теллера). Простейшее некоррелированное смещение атомов хрома не может объяснить структуру спектра ЯКР данного соединения полностью.

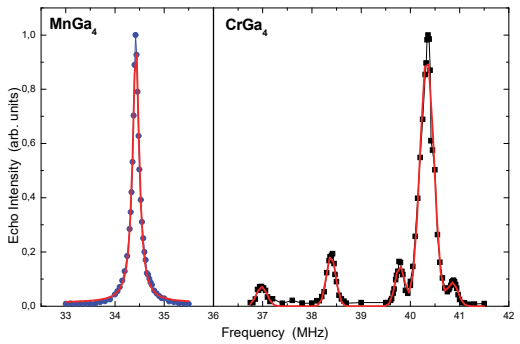


Рис.1. Спектр ЯКР ^{69}Ga для $MnGa_4$ (слева) и $CrGa_4$ (справа). Красной линией показана аппроксимация кривой Лоренца и семейством функций Гаусса для $MnGa_4$ и $CrGa_4$, соответственно.

АНТИСИММЕТРИЧНАЯ ЧАСТЬ ТЕНЗОРА ГИРАЦИИВ ОДНООСНЫХ И ДВУОСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Константинов К.К.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: tatgolovina@mail.ru

Рассчитаны зависимости от угла падения азимутов поляризации χ_r и эллиптичностей k_r отраженного света для прозрачных и поглощающих кристаллов классов 3, 4, 6, 32, 422, 622, 3*m*, 4*mm*, 6*mm*. Проведено сравнение полученных результатов с учетом антисимметричной части тензора гирации [1]. При *p*-поляризации падающего света и углах падения, близких к углу Брюстера, антисимметричная часть тензора гирации оказывает заметное влияние на величины χ_r и k_r. Если показатель преломления внешней среды близок к показателям преломления кристалла, влияние антисимметричной части существенно при любом ненулевом угле падения света (рис. 1) [2].

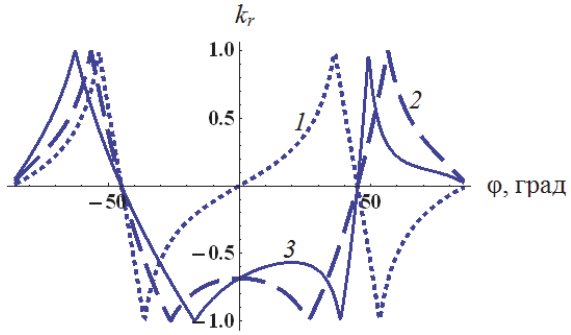


Рис. 1. Зависимости эллиптичностей k_r отраженного света от угла падения φ при p-поляризации. Оптическая ось кристалла перпендикулярна плоскости падения света. Свет падает из среды с показателем преломления, близким к показателям преломления кристалла. 1 – антисимметричный тензор гирации (классы 3m, 4mm, 6mm); 2 – симметричный (классы 32, 422, 622); 3 – имеются симметричная и антисимметричная части (классы 3, 4, 6).

Проведено сравнение азимутов поляризации χ_t и эллиптичностей k_t прошедшего света, рассчитанных с учетом и без учета антисимметричной части тензора гирации для двуосных кристаллов классов 1, 2, *m*, *mm*2 [3]. Показано, что антисимметричная часть дает малую поправку к величине удельного вращения плоскости поляризации света. В случае малой величины симметричной части тензора гирации его антисимметричная часть может оказывать заметное влияние на характеристики прошедшего света.

[1] Федоров Ф.И. Теория гиротропии. Минск: Наука и техника, 1976. 456 с.

[2] Головина Т.Г., Константинова А.Ф. и др. // Кристаллография, 2016, том 61, № 4, с. 588-595.

[3] Константинова А.Ф., Головина Т.Г. и др. // Кристаллография, 2016, том 61, № 4, с. 596-600.

ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОТ ДВУПРЕЛОМЛЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

Головина Т.Г.[1], Константинова А.Ф.[1], Набатов Б.В.[1], Дудка А.П.[1], Милль Б.В.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Московский государственный университет*
e-mail: tatgolovina@mail.ru

Для 21 кристалла семейства лангасита разного состава [1] проведен расчет показателей преломления n_o, n_e, двупреломления Δn и вращения плоскости поляризации света в направлении оптической оси ($\rho_\perp$) и в направлении, перпендикулярном к оптической оси ($\rho_\parallel$). Используя экспериментальные значения $\rho_\perp$ [2-4], экспериментальные и рассчитанные с помощью метода молекулярных рефракций [5] значения Δn, построена зависимость $\rho_\perp$ от Δn для 10 кристаллов (рис. 1), которая хорошо аппроксимируется прямой линией. С помощью данной прямой выполнена оценка $\rho_\perp$ для 11 кристаллов (рис. 1, ♦); для трех кристаллов, имеющих несколько смешанных атомных позиций, проведено измерение величины $\rho_\perp$. Полученные экспериментальные значения $\rho_\perp$ удовлетворительно согласуются с рассчитанными (рис. 1, ▲).

По программе WinOptAct [6], с использованием структурных данных и величин n_o, n_e, рассчитаны значения $\rho_\perp$ и $\rho_\parallel$ для 13 кристаллов. Зависимость $\rho_\parallel$ от Δn можно аппроксимировать двумя прямыми (рис. 1).

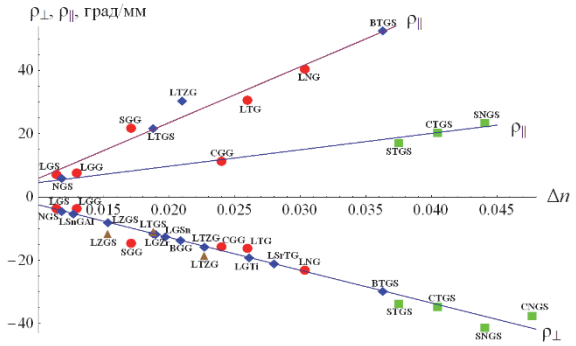


Рис. 1. Зависимость $\rho_\perp$ и $\rho_\parallel$ для правого кристалла от Δn, длина волны λ = 0.589 мкм. ● – измерены $\rho_\perp$ и Δn; ■ – измерены $\rho_\perp$, рассчитаны Δn; ♦ – рассчитанные $\rho_\perp$ и Δn; ▲ – $\rho_\perp$ измерены в [4], рассчитанные Δn. Все значения $\rho_\parallel$ – рассчитанные.

[1] Дудка А.П., Милль Б.В. // Кристаллография, 2014, том 59, № 5, с. 759.

[2] Батурина О.А., Гречушников Б.Н. и др. // Кристаллография, 1987, том 32, № 2, с. 406-412.

[3] Wei A., Wang B. et al // Cryst. Res. Technol., 2006, V. 41, № 4, p. 371-374.

[4] Константинова А.Ф., Головина Т.Г. и др. // Кристаллография, 2015, том 60, № 6, с. 950-957.

[5] Бацанов С.С. Структурная рефрактометрия. М., 1976. 304 с.

[6] Glazer A.M. // J. Appl. Cryst., 2002, V. 35, p. 652.

НОВЫЕ КРИСТАЛЛЫ $SrPb_3Br_8$. РОСТ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Голошумова А.А.,[а] Тарасова А.Ю.,[а] Исаенко Л.И.,[а, б] Елисеев А.П.,[а] Шубин Ю.В.,[в] Наумов Д.Ю.[в]

[а] Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект ак. Коптюга, 3,

[б] Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

[в] Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект ак. Лаврентьева, 3

aleksandra_tarasova@mail.ru

Постоянный активный поиск новых функциональных материалов привел к появлению семейства оптических кристаллов APb_2Br_5, где A=K, Rb. Данные соединения химически стабильны, прозрачны в широком диапазоне (0.35-30 мкм), характеризуются высокой плотностью, узким фононным спектром с минимальными тепловыми потерями, а излучательные процессы имеют высокий квантовый выход [1]. Такие свойства в сочетании с высокой плотностью открывает перспективы их использования в качестве потенциального сцинтилляционного материала. Однако для этого необходимо обеспечить возможность введения в структуру ионов РЗЭ. С этой точки зрения интерес представляет замена в APb_2Br_5 щелочного катиона стронцием, который в кристаллических структурах легко замещается ионами РЗЭ.

Цель представленной работы заключалась в получении соединения двойного бромида в системе $SrBr_2$ – $PbBr_2$ и исследовании его свойств. Для получения кристаллов в качестве исходных реагентов использовали $SrBr_2$ и $PbBr_2$, полученные растворением $SrCO_3$ и предварительно очищенного $Pb(NO_3)_2$ в HBr. Кристаллы выращивали методом Бриджмена. Методами РФА порошков и РСА монокристаллов было установлено, что в исследуемой системе образуется соединение состава $SrPb_3Br_8$. Его структура описывается ромбической симметрией Pnma, плотность составляет 6.242 г/см^3. Кристаллы этого состава прозрачны от ≈360 нм, E_g = 3.20 эВ. Результаты позволяют рассматривать данный материал в качестве потенциальной лазерной среды или сцинтиллятора, однако исследования должны быть продолжены.

[1] Isaenko L.I., Merkulov A.A., Melnikova S.V., Pashkov V.M., Tarasova A.Yu., *Crystal Growth & Design*, 2009, 9, 2248.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-32-00545.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКОЙ СЛОЖНОСТИ БОРОСИЛИКАТОВ КАЛЬЦИЯ

Горелова Л.А.[1,2], Юхно В.А[2], Кржижановская М.Г.[1], Бубнова Р.С.[1,2], Кривовичев С.В.[1]

[1] Санкт-Петербургский государственный университет

[2] Институт химии силикатов РАН

e-mail: gorelova.ljudmila@gmail.com

Исследовано термическое поведение и структурная сложность семи боросиликатов кальция: данбурита $CaB_2Si_2O_8$, окаямалита $Ca_2B_2SiO_7$, α– и β–$Ca_3B_2SiO_8$ [1], датолита $CaBSiO_4(OH)$, бакерита $Ca_4B_5Si_3O_{15}(OH)_5$ и говлита $Ca_2B_5SiO_9(OH)_5$.

Среднее объемное расширение (α_V) этих фаз составляет 33×10^{-6} °C^{-1} и сопоставимо с α_V боросиликатов щелочных металлов (36×10^{-6} °C^{-1}) [2]. Наибольшую величину α_V (56×10^{-6} °C^{-1}) имеет слоистый окаямалит, тогда как цепочечные α– и β–$Ca_3B_2SiO_8$, слоистые датолит и бакерит, а также каркасный говлит имеют близкие значения α_V ($31\pm2\times10^{-6}$ °C^{-1}). Наименьшее термическое расширение имеет обладающий каркасной структурой данбурит (19×10^{-6} °C^{-1}). Эта тенденция изменения термических свойств может быть связана с уменьшением содержания ионной компоненты CaO от 60 мол.% для $Ca_3B_2SiO_8$ до 25 мол.% в данбурите.

Структурная сложность изученных фаз оценивалась при помощи теоретико-информационных методов [3] и изменяется закономерно с увеличением содержания (OH)-групп и/или степени полимеризации анионов $BO_{3/4}$ и SiO_4. Для безводных боросиликатов сложность возрастает от цепочечного α–$Ca_3B_2SiO_8$ к слоистому окаямалиту и каркасному данбуриту. Наибольшей сложностью обладает β–$Ca_3B_2SiO_8$, структура является четырехкратной сверхструктурой относительно α–фазы. Сложность водосодержащих датолита и бакерита, структуры которых близки к структуре безводного окаямалита возрастает со степенью гидратации. Наиболее сложная структура у говлита.

[1] Бубнова Р.С, Волков С.Н., Юхно В., Кржижановская М.Г. // ФХС,2016, т. 42, с. 483–494.

[2] Бубнова Р.С., Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия боратов и боросиликатов. СПб: Изд-во «Наука». 2008. 768 с.

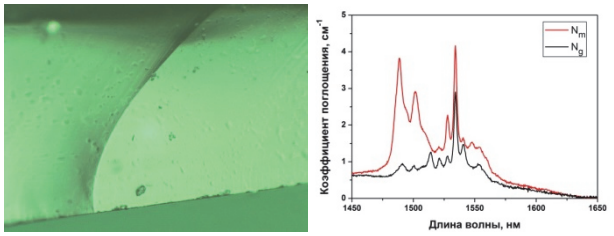
[3] Krivovichev S.V. // Angew. Chem. Int. Ed, 2014, vol. 53, p. 654–661.

МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ $Er:KGd_xYb_yY_{(1-x-y)}(WO_4)_2$ ДЛЯ ЛАЗЕРНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

Гурецкий[1] С.А, Колесова[1] И.М., Труханова[1] Е.Л., Курильчик С.В.[2], Дернович О.П.[2], Кисель В.Э.[2], Кулешов Н.В.[2]
[1] ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»
[2] НИЦ оптических материалов и технологий БНТУ
e-mail:crystal2@ifttp.bas-net.by, kurilchik.sv@gmail.com

Для создания эффективных и компактных волноводных лазеров, излучающих в спектральном диапазоне 1,5-1,6 мкм требуются активные среды в виде тонких монокристаллических слоев (МС), активированных ионами Er^{3+}. Перспективными материалами для создания таких структур являются двойные редкоземельные вольфраматы $KRe(WO_4)_2$ [1,2]. Однако концентрация ионов Er в таких матрицах не может превышать 1 ат. % [3], что не позволяет достичь необходимой разницы показателей преломления слоя и подложки для получения волноводного режима.

В данной работе нами предложены и выращены на подложке кристалла $KY(WO_4)_2$ методом жидкофазной эпитаксии МС $Er:KGd_xYb_yY_{(1-x-y)}(WO_4)_2$, в которых за счет оптимизации химического состава слоя выполняется согласование параметров кристаллической решетки слоя и подложки, а также достигнута необходимая разность по показателю преломления. На рис. 1 приведены снимок, сделанный через микроскоп Полам РП-1 (ЛОМО), и спектр поглощения, измеренный на спектрофотометре Cary 5000 (Varian) в спектральном диапазоне около 1,5 мкм, изготовленного МС.



(а) (б)

Рис.1. Снимок (а) и спектр поглощения (б) выращенного монокристаллического слоя

Синтез МС проводился в печи электросопротивления. В качестве растворителя использовался бивольфрамат калия ($K_2W_2O_7$). Процесс выращивания проводился в температурном диапазоне 900-920°C. Скорость вращения подложки 30-40 об./мин.

[1] Pollnau M., Romanyuk Y.E. et al. // Quantum Electron., 2007, Vol, 13, p. 661-671.

[2] Bain F.M., Lagatsky A.A., Kurilchick S.V. et al. // Optics Express, Vol.17, No.3, p.1666-1670.

[3] Gorbachenya K.N., Kisel V.E. et al. // Laser Physics, 2014, Vol.23, p. 125005.

$InSbS_3$ – НОВЫЙ ПРЕДСТАВИТЕЛЬ ТРУБЧАТЫХ КРИСТАЛЛОВ

Давыгора А.П., Сыров Ю.В.
Московский технологический университет (Институт тонких химических технологий)
e-mail: yvsyrov@yandex.ru

Чаще всего кристаллы встречаются в форме выпуклого многогранника с плоскими гранями, не имеющего внутренних полостей. Однако в ряде случаев кристаллы приобретают иные формы. Это могут быть игольчатые, нитевидные образования, разного рода скелетные кристаллы. Особенно редко встречаются кристаллы в форме трубок (трубчатые кристаллы). Интерес к исследованию трубчатых кристаллов связан как с изучением теоретических вопросов роста кристаллов, так и с практическими применениями, с учетом возможных полупроводниковых и кристаллофизических свойств. В ходе исследования взаимодействия паров элементарной серы с монокристаллическим антимонидом индия, покрытым тонким ~20 мкм слоем поликристаллической сурьмы, нами впервые обнаружено, что в результате химической реакции на поверхности сурьмы вырастают трубчатые кристаллы. Целью настоящей работы является изучение морфологии и состава данных кристаллов.

В результате электронно-микроскопических исследований с применением рентгенофлуоресцентного микроанализа было установлено, что трубчатые кристаллы ориентируются главным образом перпендикулярно исходному слою сурьмы. Внешняя огранка трубочек характеризуется плоскими гранями и представляет собой комбинацию из пинакоидов и ромбических призм (сечение всех трубочек напоминает искаженный квадрат). Внутренняя поверхность трубочек имеет кривизну. Внутренние ребра менее выражены. На вид кристаллы относятся к моноклинной сингонии. Диаметр трубочек находится в пределах от 1.5 до 8 мкм. Толщина стенок трубочек не зависит от их диаметра и составляет около 0.5 мкм. Элементный анализ показал, что состав трубочек можно определить как In : Sb : S = 1 : 1 : 3, то есть формально он соответствует соединению состава $InSbS_3$.

СПЕКТРОСКОПИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ЭЛЕКТРОНОВ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ТОНКИХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ПЛЕНКАХ

Дементьева М.М.[1], Приходько К.Е.[1,2]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *НИЯУ «МИФИ»*
e-mail: dementyeva_mm@nrcki.ru

Для разработки элементов криоэлектроники на основе пленок NbN мы используем радиационные методы направленного изменения атомного состава и электрических свойств [1]. Целью данной работы является изучение эволюции электрических свойств, а именно электронной плотности в пленках NbN при различных дозах облучения.

Поперечные срезы пленок NbN, облученные ионами O^+ малых энергий в диапазоне доз (10 – 40) с.н.а. по азоту, исследовали методом СЭПЭ в области плазмонных потерь: $E_p=\frac{h}{2\pi}\omega_p=\frac{h}{2\pi}\left(\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}\right)^{\frac{1}{2}} \approx 20$ эВ, где n – плотность свободных электронов. Функция распределения потерь энергии выражается через диэлектрическую функцию $\varepsilon=\varepsilon_1+i\varepsilon_2$, где ε_1 - степень поляризации электронной системы, а ε_2 – мера поглощения электронной системы. Энергии плазмонных потерь соответствует значение $\varepsilon_1=0$. Для определения ε_1 используется преобразование Крамерса-Кронига. Согласно данной модели, была рассчитана плотность свободных электронов для различных доз облучения в модифицированной (верхней) области пленки и в нижней, прилегающей к подложке (рис. 1). На графике наглядно видно, как с увеличением дозы облучения, падает плотность свободных электронов, что обусловлено заменой атомов азота на атомы кислорода и трансформацией исходного NbN в диэлектрик Nb_2O_5.

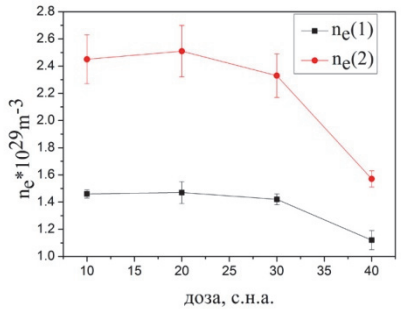


Рис.1.Зависимость плотности свободных электронов от дозы облучения для верхней области пленки $n_e(1)$ и нижней области вблизи подложки $n_e(2)$.

[1] Гурович Б.А., Приходько К.Е. и др. // ЖЭТФ, 2013, том 143, № 6, с 1062-1076.

Работа поддержана Минобрнауки РФ – соглашение о предоставлении субсидии № 14.607.21.0005 (уникальный идентификатор RFMEFI60714X0005).

МНОГОСЛОЙНЫЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ЗАДАЧ РЕНТГЕНОВСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Дикая О.А.[1], Медведева С.С.[1], Максимова К.Ю.[1], Гойхман А.Ю.[1]
[1] *ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. И. Канта»*
e-mail: odikaya@innopark.kantiana.ru

Область применения многослойных тонкопленочных структур (МС) в современной кристаллографии довольно широка: от оптических элементов (зеркала, монохроматоры) в рентгеновских, синхротронных и нейтронных установках [1,2] до специфических устройств в узконаправленных исследованиях (техника стоячей волны [3]). К подобным структурам выдвигаются строгие требования: хороший контроль толщины на этапе роста, единообразие слоев, контролируемый градиент или его полное отсутствие, высокая чистота материалов, низкая допустимая шероховатость интерфейсов и поверхности (порядка нескольких ангстрем), количество слоев может варьироваться в пределах от 2 до1000 и более.

В работе представлен метод ионно-плазменного осаждения как гибкий и точный инструмент для создания МС высокого качества: толщина слоя 2-500 нм., шероховатость порядка 2-7 Å, градиент толщины не более 5 Å, однородность и единообразие слоев, большой выбор материалов (проводящие и непроводящие, оксиды и нитриды), гладкие границы между слоями, все слои осаждаются в одном вакуумном процессе, возможно использование плазмы Ar и Kr. Данная техника приспособлена для длительной работы и позволяет осаждать до 1000 слоев в одном процессе, что гарантирует их идентичность.

В настоящей работе были созданы серии МС Si/Ta, ZrO_x/SiO_2, Ni/Al, NiO_x/AlO_x на подложках предварительно окисленного кремния или сапфира. В результате исследований структур методами сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и ожэ-электронного глубинного профилирования проведено сравнение шероховатости слоев и межслоевой интердиффузии. Анализ данных рентгеновской рефлектометрии и эксперимента по генерации стоячих волн позволил охарактеризовать функциональных свойства МС. Полученные материалы можно использовать в качестве отражающих элементов, калибровочных образцов для настройки фокуса рентгеновских источников, генераторов стоячих волн в исследованиях белковых структур.

[1] F. Doring, et al., Optics Express, Vol. 21, No. 16 (2013)
[2] X. Huang, et al., Optics Express, Vol. 23, No. 10 (2015)
[3] E. Schneck, et al., Current Opinion in Colloid & Interface Science 244-252 (2015) 20

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА ЧАСТИЧНО УПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ ИЗ ВКЛЮЧЕНИЙ В СМЕКТИЧЕСКИХ НАНОПЛЁНКАХ

Долганов В.К.[1], Шуравин Н.С.[1,2] Долганов П.В.[1]
[1]*Институт физики твёрдого тела РАН*
[2]*Московский физико-технический институт (государственный университет)*
e-mail: pauldol@issp.ac.ru

В докладе представлены результаты исследований образования и трансформации частично упорядоченных структур из включений в смектических наноплёнках. В качестве среды для образования частично упорядоченных структур использовались свободно подвешенные полярные жидкокристаллические наноплёнки толщиной от одного до нескольких десятков молекулярных слоёв. Включения представляли собой смектические острова большей толщины, чем наноплёнки. Описаны способы получения наноплёнок и островов. Образование частично упорядоченных структур является примером упорядочения, реализующегося в “мягкой” материи [1]. Показано, что взаимодействие включений может кардинально отличаться на больших (по сравнению с размером включений) и малых расстояниях. На больших расстояниях частицы взаимодействуют как топологические диполи и квадруполи с участием топологических дефектов, находящихся в наноплёнке (топологический заряд S=-1) или на границе смектических островов. При контакте островов энергия границы уменьшается по сравнению с энергией изолированных островов, что приводит к их деформации и образованию частично упорядоченных структур. В докладе представлены наблюдавшиеся в экспериментах различные типы кластеров, двумерных плотноупакованных структур, обсуждаются механизмы их формирования. Описанное в докладе образование частично упорядоченных структур в наноплёнках представляет интерес для физики и технологии наноматериалов.

Исследование выполнено при частичной поддержке РФФИ, грант 15-02-05706.

[1] Dolganov P.V., Shuravin N.S et al. // Phys. Rev. E, 2016, v. 93, p. 032704.

МОНОКРИСТАЛЛЫ ОЛИГОТИОФЕН-ФЕНИЛЕНОВ ДЛЯ ГИБКОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Доминский Д.И.[1], Казанцев М.С.[2,3], Константинов В.Г.[1], Тафеенко В.А.[4], Лупоносов Ю.Н.[5], Пономаренко С.А.[5], Паращук Д.Ю.[1]
[1] *Физический факультет и Международный лазерный центр, МГУ им. М.В. Ломоносова*
[2]*Новосибирский государственный университет*
[3]*Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН*
[4] *Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова*
[5]*Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова*
e-mail: di.dominskiy@physics.msu.ru

Монокристаллы тиофен-фениленовых со-олигомеров являются многообещающими оптоэлектронными материалами для гибких светоизлучающих устройств, так как они сочетают в себе эффективный транспорт носителей заряда и высокую люминесценцию [1,2].

Из производной тиофен-фениленовых со-олигомеров (DH-TTPTT, рис.1а) были впервые выращены монокристаллы (рис. 1б), установлена их структура (рис. 1в) и исследованы их фотолюминесцентные и полупроводниковые свойства. Результатом роста из раствора были пластинчатые гибкие монокристаллы длиной до 1 см, шириной 50-200 мкм и толщиной 100-1000 нм со ступенчатой поверхностью. Внешний квантовый выход фотолюминесценции кристаллов достигает 7%. Максимальный критический радиус кривизны кристаллической иголки DH-TTPTT, при котором иголка не ломается, составляет 0.09 мм (рис.1г). Из монокристаллов были изготовлены полевые транзисторы, проявившие подвижность p-типа до 0,083 см^2/Вс (рис.1д). Обсуждаются перспективы кристаллов DH-TTPTT для гибкой оптоэлектроники.

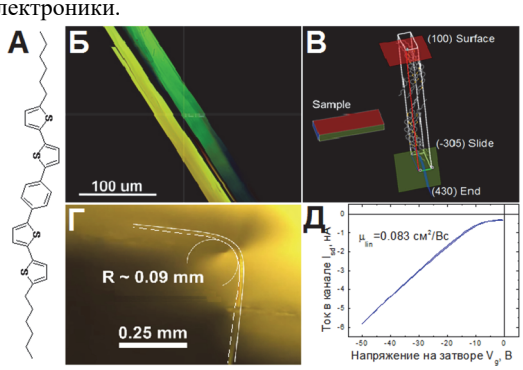


Рис.1. А) Структура молекулы DH-TTPTT, Б) Кристаллы DH-TTPTT, выращенные из раствора, В) ориентация молекул в кристаллической ячейке и относительно пластинки, Г) измерение гибкости монокристалла, Д) передаточные кривые полевого транзистора на основе DH-TTPTT.

[1] Hotta S., T. Yamao, et al. // Journal of Materials Chemistry, 2011, Vol. 21, №5, P. 1295-1304

[2] Kudryashova L. G., Kazantsev M.S., et al. // ACS Applied Materials & Interfaces, 2016, Vol. 8, №16, P. 10088-10092

МЕТОД СМЕШАННОЙ СИММЕТРИИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛЕ

Дудка А.П., Новикова Н.Е.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Значительная часть функциональных материалов имеет разупорядоченную кристаллическую структуру. Кристалл может состоять из элементарных ячеек близкой метрики, содержимое которых будет различаться сортом и положениями атомов. Возможно, что и симметрия некоторых атомов в «возмущенных» ячейках будет отличаться от средней симметрии. Использование модели смешанных атомных позиций нельзя признать удовлетворительным способом хотя бы потому, что формально она лишена физического смысла (в одной точке пространства не может быть двух атомов разных сортов).

Разработана новая модель смешанной симметрии для описания локального разупорядочения атомов (ближнего порядка). Каждый атом в ячейке может быть описан собственной пространственной группой. Известное выражение для вычисленного структурного фактора теперь включает суммирование по разным наборам операций симметрии. Для облегчения поиска новых элементов симметрии создан «эксперт разупорядочения атомов», который оценивает значимость новых моделей.

Новый метод проверен при исследовании кристаллов нескольких семейств. Показано, что частичное понижение симметрии, которое, конечно, сопровождается увеличением числа подгоночных параметров, далеко не всегда является значимым. Например, для кристаллов семейства лангасита из возможных 69 подвижек атомов, которые могут нарушить симметрию, только 2 смещения являются значимыми, причем именно те, которые ранее были фиксированы методом изоморфных замещений и температурных воздействий. Структура кристаллов Bi_2WO_6 (фаз Ауривиллиуса) была описана тремя локальными группами симметрии: $P11b$, $P1c1$ и $C1c1$ и показано, что найденная ранее пр.гр. $P2_1ab$ пригодна для описания только тяжелых атомов Bi и W.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ИК РАН (RFMEFI62114X0005) и при частичной поддержке РФФИ (№ 16-02-00171).

АЛГОРИТМ И ПРОГРАММА ДЛЯ ПРЕЦИЗИОННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ МОНОКРИСТАЛЛОВ С УЧЕТОМ ЭКСЦЕНТРИСИТЕТА ОБРАЗЦА

Дудка А.П., Смирнова Е.С., Верин И.А., Болотина Н.Б.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Многие важные свойства кристаллов обусловлены факторами, вызывающими небольшие отклонения от трехмерной периодичности или нарушение симметрии. В таких случаях необходимо прецизионное уточнение параметров элементарной ячейки. На дифрактометре с точечным детектором дифракционные профили, используемые для определения размеров ячейки, могут быть измерены с шагом 0.0005-0.001 градуса, что дает установочные углы рефлексов высокой точности.

В работе описан новый алгоритм для прецизионного определения параметров элементарной ячейки монокристаллов с компенсацией систематических ошибок в данных. Процедура уточнения нелинейным МНК позволяет накладывать связи на параметры ячейки, уточнять нулевые углы гониометра, эксцентриситет образца, расстояния в гониометре *Ds*, *Dc* и длину волны излучения. Разработан новый метод учета эксцентриситета образца (***x,y,z***) с учетом расходимости первичного пучка β и возможного отклонения оси детектора от экваториальной плоскости Δ*h* (рисунок). Отработана методика использования «сбалансированного» набора рефлексов в области дальних углов (2θ=140-150°) с центрированием только Mo*K*α1-линий.

Программа использована для поиска тетрагональных искажений в кубической ячейке кристалла додекаборида LuB_{12} (*Fm*-3*m* → *I*4/*mmm* → *Fmmm*) на рентгеновском дифрактометре Huber-5042 с точечным детектором и гелиевым криостатом замкнутого цикла Displex DE-202 в интервале температур 20-295 K.

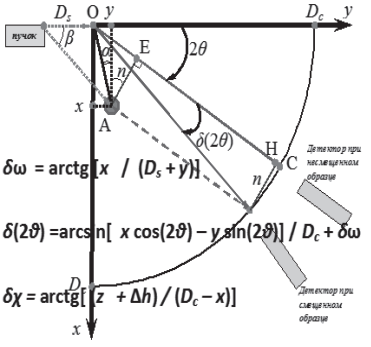


Рис. Геометрия дифракции с учетом эксцентриситета образца. Расчет поправок к дифракционным углам

Авторы благодарят Хрыкину О.Н. Работа частично выполнена при поддержке РФФИ (№ 14-02-00531, 16-02-00171).

УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ДОДЕКАБОРИДА LuB_{12}: РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПРОВЕДЕНИЯ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НАИВЫСШЕЙ ТОЧНОСТИ

Дудка А.П., Хрыкина О.Н., Болотина Н.Б.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Додекабориды *d*-переходных и 4*f*-редкоземельных элементов RB_{12} (*R*= Y, Zr, Gd÷Lu), пр. гр. *Fm*-3*m*, демонстрируют многообразие полезных свойств. Аномалия физических свойств додекаборидов указывает на возможные структурные искажения решетки: понижение симметрии, расщепление позиций, изотопное разупорядочение B_{12}. Выявление столь тонких деталей атомного строения находится на пределе точности структурного метода и требует инновационных подходов к исследованию.

Монокристаллы LuB_{12} исключительного дифракционного качества выращены методом бестигельной зонной плавки. Дифракционные экспериментальные данные высокого разрешения ($\sin\theta/\lambda_{max}$ = 1.36 $Å^{-1}$) собраны на дифрактометре с точечным детектором CAD4 (Enraf-Nonius). В отличие от дифрактометров с 2D-детектором, CAD4 позволяет измерять равноточные интенсивности путем планирования эксперимента и двухстадийного сбора данных.

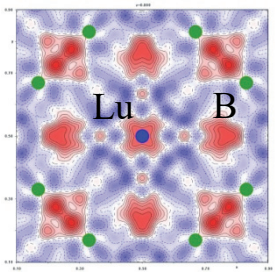


Рис. Разностный фурье-синтез в сечении z=0 дает экстраординарную детализацию электронной плотности на химических связях

Использованы методы: профильный анализ; непараметрическая коррекция дрейфа аппаратуры; коррекция на тепловое диффузное рассеяние и на поглощение в эллипсоидальных образцах; усреднение рефлексов с формированием адекватной весовой схемы; статистические тесты; эксперты уточнения. Результаты: *R*-факторы уточнения $R1(|F|)/wR2(|F|)$ = 0.201/0.138% при $\Delta\rho_{min}/\Delta\rho_{max}$ = -0.11/0.13 e/$Å^3$ (271 рефлекс, 13 параметров). Установлено разупорядочение позиции атома Lu, которое было описано ангармонической моделью атомных смещений. Надеемся, что при таком высоком качестве карт электронной плотности можно провести топологический анализ без использования мультипольной модели.

Авторы благодарят Шицевалову Н.Ю., Азаревича А.Н., Случанко Н.Е. Работа частично выполнена при поддержке РФФИ № 16-02-00171.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ПРОСТЫХ И СЛОЖНЫХ МОЛИБДАТОВ ГАДОЛИНИЯ

Дудникова В.Б. [1], Жариков Е.В. [2]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*
[2]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН*
e-mail: VDudnikova@hotmail.com

Молибдат гадолиния и натрий-гадолиниевый молибдат представляют значительный интерес для создания твердотельных лазеров, люминофоров и светодиодов белого цвета. Атомистическое моделирование важно для характеризации этих систем в связи с существующей настоятельной потребностью в изучении их структурных, механических и термодинамических свойств.

Моделирование кристаллов молибдата гадолиния позволило получить систему потенциалов, которая адекватно описывает важнейшие свойства этого сегнетоэлектрика-сегнетоэластика, и одновременно является трансферабельной по отношению к двойным молибдатам. Затем было проведено моделирование натрий-гадолиниевого молибдата стехиометрического ($Na_{1/2}Gd_{1/2}MoO_4$) и катион-дефицитного ($Na_{2/7}Gd_{4/7}MoO_4$) составов. Для катион-дефицитных кристаллов было рассмотрено статистическое распределение натрия, гадолиния и незанятых позиций в структуре $I4_1/a$, согласно данным работ [1,2], а также частичное их упорядочение в рамках пространственной группы $I\bar{4}$, по данным работы [3].

Полученные значения параметров структуры исследованных кристаллов неплохо воспроизводят экспериментальные данные. Кроме того, предсказан целый ряд важных упругих и термодинамических свойств натрий-гадолиниевых молибдатов. Проанализирована их локальная структура. Обсуждается вопрос влияния отклонения от стехиометрии и частичного упорядочения на свойства этих кристаллов.

[1]. Zhao W., Lin Z. et al. J.Alloys Comp. 2011, V. 509, p. 2815-.2818

[2]. Kuz'micheva G. M., Kaurova I. A. et al. CrystEngComm. 2016, V. 18, p 2921-2928.

[3]. Morozov V., Arakcheeva A. et al. Inorg. Chem. 2012, V. 51, p. 5313-5324.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ проект № 15-05-06742.

УЛЬТРАГЛАДКИЕ НИЗКОДЕФЕКТНЫЕ СЛОИ ALN НА ПОДЛОЖКАХ САПФИРА

Езубченко И.С., Грищенко Ю.В., Майборода И.О., Занавескин М.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: ezivan9@gmail.com

Нитриды металлов III-группы и их твердые растворы широко используются в производстве СВЧ устройств [1]. Отсутствие коммерчески доступных подложек GaN для роста приводит к необходимости использовать рассогласованные по параметру решетки подложки. Из-за этого при росте начального слоя возникают проникающие дефекты, снижающие электрофизические параметры гетероструктуры [2]. Следовательно, рост начальных слоев высокого кристаллического качества является одним из ключевых факторов для формирования качественных структур для нитридной электроники.

В данной работе мы сообщаем о получении слоев AlN на подложке сапфира методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) с рекордно низкой среднеквадратичной шероховатостью 2 А (рис.1) и улучшенным структурным совершенством. Для роста был использован двухстадийный подход. На первой стадии на нитридизованном сапфире при высоком потоке аммиака формировался низкотемпературный слой AlN толщиной 10 нм. На второй стадии была выращена пленка высокотемпературного AlN толщиной 300 нм. Ширина пиков рентгеновской дифракции в отражении (0002) составила 120 угловых секунд, что говорит о высоком структурном качестве пленки.

Экспериментальная часть работы была выполнена на оборудовании Ресурсного Центра Зондовой и Электронной Микроскопии и Ресурсного Центра Лабораторных Рентгеновских Методов (Курчатовский Комплекс НБИКС-технологий, НИЦ “Курчатовский институт”).

Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда поддержки научно-проектной деятельности студентов, аспирантов и молодых ученых «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-32-80010 «мол_эв_а».

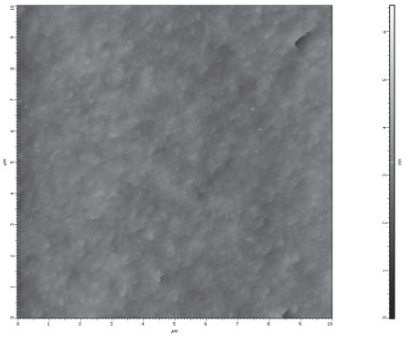


Рис. 1. АСМ изображение поверхности пленки AlN.

[1] Федоров Ю.В. // ЭЛЕКТРОНИКА: Наука. Технология. Бизнес, 2011, том2, с. 92

[2] R. Oberhuberet. al. // Appl. Phys. Lett., 1998, том 73, с. 818

ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СЛОЕВ GaN И AlN НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВУМЕРНОГО ГАЗА В HEMT ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Елиференко К.Ю., Вавилова Е.А., Езубченко И.С., Майборода И.О., Занавескин М.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: dr.eliferencko@yandex.ru

Транзисторы с высокой подвижностью электронов на основе GaN (GaN HEMT) используются для изготовления СВЧ и КВЧ устройств, характеризующихся сочетанием высокой удельной мощности и высоких рабочих частот. Одной из проблем нитридной электроники является влияние поверхностных электроактивных состояний на характеристики устройств [1], а так же деградация верхних слоев эпитаксиальных гетероструктур для GaN HEMT при взаимодействии с атмосферой и в процессе изготовления транзисторов под воздействием жидкостных травителей, плазмы и т.д. Одним из способов борьбы с поверхностными электроактивными состояниями и защиты поверхности от агрессивных воздействий является формирование слоев in situ пассивации непосредственно после роста структуры [2].

В данной работе показано, что слои GaN и AlN, выращенные при низких температурах методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии, меняют свою морфологию и кристаллическую структуру, переставая проявлять поляризационные свойства, что позволяет использовать их в качестве пассивирующих слоев, не оказывающих негативного влияния на электрофизические характеристики проводящего канала GaN HEMT.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 14.607.21.0116 от 14.10.2015, RFMEFI60715X0116).

[1] Ramakrishna Vetury et al. // IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES, 2001, VOL. 48, NO. 3., 560-566

[2] B. Heying, I.P. Smorchkova, R. Coffie et al. // ELECTRONICS LETTERS 5th July 2007, Vol. 43, No. 14.

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ DKDP

Еремеев А.П.[1,2], Иванова Е.С.[1], Петржик Е.А.[1]
[1] *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет*
e-mail: ivanova.el.ser@gmail.com

Уже известно, что экспозиция сегнетоэлектрика триглицинсульфата в постоянном магнитном поле при комнатной температуре, когда кристалл находится в сегнетофазе, приводит к изменению его диэлектрических свойств. Такая постановка эксперимента не дает однозначный ответ об объектах, на которые воздействует поле – это могут быть и непосредственно доменные стенки, и пиннингующие их точечные дефекты. Поэтому представлялось интересным выяснить, влияет ли постоянное магнитное поле на диэлектрические свойства сегнетоэлектрических кристаллов, если проводить магнитную экспозицию в парафазе.

Исследовались сегнетоэлектрические кристаллы дейтерированного дигидрофосфата калия (DKDP), имеющие фазовый переход I рода. В зависимости от степени дейтерирования фазовый переход в DKDP происходит в интервале температур от 170 до 220 K, т.е. при комнатной температуре кристалл находится в парафазе. Измерялись температурные зависимости диэлектрической проницаемости кристаллов DKDP с различной степенью дейтерирования в области фазового перехода до и после экспозиции образцов в постоянном магнитном поле 2T в течение 20 минут при комнатной температуре.

Обнаружено уменьшение максимального значения диэлектрической проницаемости после магнитного воздействия для всех образцов, как при нагреве, так и при охлаждении (Рис.1а). Также наблюдалось изменение величины температурного гистерезиса ΔT фазового перехода (Рис.1б). Характер изменения ΔT оказался различным для кристаллов с различной историей и не зависел от степени дейтерирования.

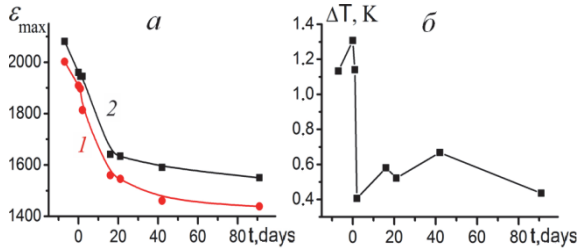


Рис.1. Зависимости от времени, прошедшего после магнитной экспозиции: а – величины максимума диэлектрической проницаемости ε_{max} при нагреве (1) и охлаждении (2) б - ΔT при нагреве и охлаждении.

ИССЛЕДОВАНИЕ БЛИЖНЕГО И ДАЛЬНЕГО ПОРЯДКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В НИОБИЙ-ЗАМЕЩЕННЫХ КОБАЛЬТИТНЫХ СОСТАВАХ МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

Ефимова Е.А.[1,2], Троянчук И.О.[3], Тютюнников С.И.[1], Карпинский Д.В.[3], Ефимов В.В.[1], Ritter C.[4]
[1] *Объединённый институт ядерных исследований*
[3] *Научно-практический центр по материаловедению НАН РБ*
[4] *Institute Laue Langevin*
e-mail: efea@mail.ru

Целью работы было экспериментальное исследование взаимосвязи кристаллической структуры ближнего и дальнего порядка с электрическими и магнитотраспортными свойствами перовскитоподобных Nb-замещённых кобальтитных соединений.

Исследование изменений ближнего порядка было проведено с помощью метода рентгеновской спектроскопии поглощения в области протяжённой тонкой (область EXAFS) и околопороговой (область XANES) структуры рентгеновского спектра поглощения, и связано, соответственно, с изменениями локальной атомной и электронной структуры.

Для изучения трансформаций дальнего порядка кристаллической и магнитной структуры применялись методы нейтронной дифракции.

Одновременное замещение лантана на стронций и кобальта на ниобий в этих системах позволило изменить концентрацию разновалентных ионов кобальта и варьировать их спиновое состояние, что в значительной степени влияет на электрические и магнитотранспортные свойства исследуемых соединений.

Рассмотрены возможные механизмы спиновых переходов ионов кобальта в широком диапазоне температур.

РОЛЬ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ И ПРИМЕСЕЙ В МЕХАНИЗМЕ УВЕЛИЧЕНИЯ СКОРОСТИ РОСТА КРИСТАЛЛОВ KDP

Ефремова Е.П.[1], Охрименко Т.М.[1], Лященко А.К.[2]
[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*
Kuznetsov@ns.crys.ras.ru

Изучены эффекты комплексообразования и гидратации молекул собственного вещества и примесей в объеме раствора и на границе кристалл-раствор при выращивании кристаллов KDP (KH_2PO_4) с высокими скоростями роста. В первой серии экспериментов исследована кинетика роста кристаллов с примесями нитратов и хлоридов Ca^{2+}, Ba^{2+} в диапазоне концентраций 8.10^{-8}-$1.25.10^{-3}$ моль Me^{2+}/моль KDP. Во второй - исследована кинетика роста кристаллов с добавками неэлектролитов, стабилизирующими структуру воды (ацетон, изопропанол, диметилмочевина); разрушающими структуру воды (мочевина, этиленгликоль, муравьиная кислота). Диапазон концентраций добавки 1.10^{-5} - 1.10^{-2} моль доб./моль KDP.

В обеих сериях кристаллы выращивались в кинетическом режиме роста в течение суток в кристаллизаторе объемом 1л. Температура насыщения раствора 323К и 303К, относительное пересыщение - 0.025. Измерялись скорости роста (R) граней {101} и {100}от концентрации примеси или добавки - $R(C_{Me2+/доб})$.

Обнаружено значительное увеличение R_{101} с примесью $BaCl_2$. Установлена зависимость $R(C_{Me2+})$ от гидратации катионов и устойчивости комплексов, образуемых в растворе ионами примесных солей. $R(C_{доб})$ увеличивается в случае гидрофильной гидратации и уменьшается для гидрофобной, что соответствует различиям проявления эффектов гидратации молекул неэлектролитов в водных растворах. Предложена модель, объясняющая наблюдаемые эффекты с позиций сохранения или разрушения единой тетраэдрической сетки водородных связей в водном растворе и на поверхности кристалла, облегчающих диффузию ионов калия к растущей поверхности и определяющих различную гидратацию собственных катионов и примесей.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАТРИЙ-ГАДОЛИНИЕВЫХ МОЛИБДАТОВ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО И КАТИОН-ДЕФИЦИТНОГО СОСТАВОВ

Жариков Е.В.[1,2], Кузьмичева Г.М.[3], Каурова И.А.[3], Рыбаков В.Б.[4], Лис Д.А.[1], Субботин К.А.[1]
[1] *Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева*
[2] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук*
[3] *Московский технологический университет*
[4] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*
e-mail: zharikov@rctu.ru

Применение кристаллов натрий-гадолиниевого молибдата (НГМ) в качестве лазерных матриц, основы для люминофоров и светодиодов белого цвета ограничивается изменением состава, симметрии, а также возможной модуляцией структуры.

Методом рентгеновской дифрактометрии изучены монокристаллы НГМ стехиометрического ($Na_{1/2}Gd_{1/2}MoO_4$), и двух катион-дефицитных составов $Na_{2/7}Gd_{4/7}\square_{1/7})MoO_4$, $Na_{6/15}Gd_{8/15}\square_{1/15})MoO_4$ ($\square$ - вакансии) составов. Кристаллы были выращены методом Чохральского в слабо-окислительной атмосфере. Обсуждается получение кристаллов с упорядоченной структурой в зависимости от рациональности соотношения формульных коэффициентов компонентов в додекаэдрической позиции структуры шеелита. Установлен вид и концентрация точечных дефектов: (соотношение Na и Gd в додекаэдрической позиции; вакансии в тетраэдрической (Mo) и кислородной позициях). Выявлено присутствие дополнительных отражений (50%) для $(Na_{1/2}Gd_{1/2})MoO_4$:10%Yb, свидетельствующее о понижении симметрии от пр. гр. $I4_1/a$ к пр. гр. $P\bar{4}$ без изменения параметров ячейки, а также их увеличение в кратное число раз для $(Na_{1/2}Gd_{1/2})MoO_4$ с 3% Yb и 10%Yb, что можно объяснить кинетическим фазовым переходом типа порядок-беспорядок, вызванным упорядочением катионов по додекаэдрическим позициям в локальных частях кристаллов.

Выделены причины возможного понижения симметрии в кристаллах семейства шеелита и связанные с этим условия проведения ростового и структурного экспериментов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки Российской Федерации (№ 4.745.2014/К; 2014-2016).

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ НОВОГО ИТТРИЙ-РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ПРЕДСТАВИТЕЛЯ ГРУППЫ ГАДОЛИНИТА

Зарубина Е.С.[1], Расцветаева Р.К.[1], Сапегина А.В.[2], Чуканов Н.В.[3], Аксёнов С.М.[1,4]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

2Московский государственный университет

[3]Институт проблем химической физики РАН

[2]Институт элементоорганических соединений РАН

E-mail: rast@ns.crys.ras.ru

Группа гадолинита-датолита объединяет девять минеральных видов, шесть из которых являются бериллосиликатами Y и *REE* [гадолинит-(Y), гадолинит-(Ce), хинганит-(Y), хинганит-(Ce), хинганит-(Yb) и минасжераисит-(Y)]. Они характеризуются топологически сходным структурным типом [1]. Между гадолинитом-(Y) и хинганитом-(Y) [2] реализуется изоморфный ряд по схеме: $Fe^{2+}+2O^{2-} \leftrightarrow \square+2(OH)^{-}$. Нами изучен образец гадолинита-(Y) из пегматитовых пород Норвегии с эмпирической формулой: $(Y_{1.1-1.7}Ca_{0.5-0.6}Ce_{0.05-0.2}Na_{0-0.1})Fe_{0.4-0.7}Be_2(Si_{1.9-2.0}P_{0-0.1})(O,OH)_{10}$. Минерал изучен методом рентгеноструктурного анализа. Параметры моноклинной ячейки: a=9.941(2), b=7.572(2), c=4.751(1) Å, β=90.00(1)°, пр.гр. $P2_1/c$, Z=2. Структура уточнена до R=1.89 % [808 $I>2\sigma(I)$]. Кристаллохимическая формула имеет вид: $^{A}(Y_{1.4}Ca_{0.55}Ce_{0.05})^{B}(Fe^{2+}_{0.57}\square_{0.43})[^{C}Be_2Si_2O_8{}^{X}(OH_{1.41}O_{0.59})]$. Наличие гидроксильных групп подтверждается локальным балансом валентностей и данными ИК-спектроскопии. Исследованный минерала по химическому составу является промежуточным между гадолинитом-(Y) и хинганитом-(Y): по содержанию железа он ближе к гадолиниту, а OH-групп – к хинганиту. Особенностью состава минерала является также примесь Ca, а доминирование OH-групп в *X*-позиции делает его потенциально новым видом.

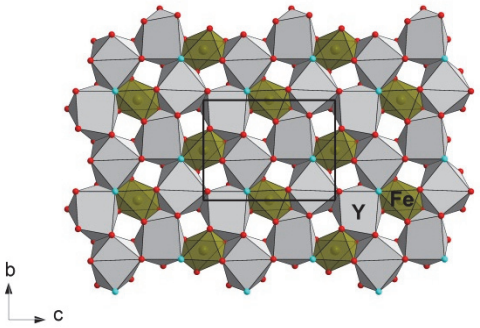


Рис. 1. Гетерополиэдрический слой в структуре изученного гадолинита.

[1] Расцветаева Р.К., Пущаровский Д.Ю., Пеков И.В., Волошин А.В. // Кристаллография, 1996, том 41, № 2, с 235-239.

[2] Demartin F., P.K., Minaglia A., C.M.,Gramaccioli C.M. // Can. Mineral., 2001, vol 39, p 1105-1114.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-03-00691-а и Президента МК-8033.2016.5.

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ИХ СВЯЗЬ С ДЕФОРМАЦИЕЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ СЖАТИИ ОКСАЛАТОВ ИТТРИЯ И САМАРИЯ

Захаров Б.А.[1,2], Матвиенко А.А.[1], Грибов П.А.[1,2], Болдырева Е.В.[1]

[1] Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

[2] Новосибирский государственный университет

e-mail: b.zakharov@yahoo.com

Химические реакции с участием твердых тел характеризуются тем, что при их протекании образуется продукт с отличающимися от исходного реагента кристаллической структурой и объемом. Структурные изменения, как и изменения объема вызывают деформации и напряжения в реакционной полости. Влияние напряжений на химическую реакцию наиболее значимо при реакциях термического разложения из-за больших изменений объема, что сказывается на возникновении сильных напряжений и вызывает разрушение кристалла во время реакции. Оксалаты лантаноидов являются очень удобными объектами для исследования подобных явлений. Одним из главных преимуществ этих соединений является факт, что разложение гидратов может происходить с сохранением монокристалла, что позволяет изучить изменения в морфологии, деформации и кристаллической структуре во время реакции.

Целью данной работы было изучение деформаций кристаллической структуры в ходе дегидратации оксалатов иттрия и самария и выявление главных факторов, влияющих на морфологию продукта и разрушение кристалла. Для достижения цели были изучены кристаллические структуры исходных реагентов и продуктов реакции, термомеханический эффект и структурные деформации с помощью оптической микроскопии и монокристального рентгеноструктурного анализа. Для выявления жесткости структуры в отдельных направлениях и её стабильности было исследовано влияние гидростатического давления (вплоть до 5 ГПа) на кристаллические структуры исходных декагидратов оксалатов иттрия и самария, что позволило выявить связь между направлениями деформации структур при дегидратации и гидростатическом сжатии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 16-33-60093.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО СОЕДИНЕНИЯ ПЛАТИНЫ - $Pt\ La_6\ (La_9, Sr_3)(\ Pt_{0,9}\ Cu_{0,1})_4O_{42}$

Зельбст Э.А., Фундаменский В.С., Кашаев А.А.
Педагогический институт Иркутского государственного университета
e-mail: zelbst@rambler.ru

В структуре нового окисла установлены цепочки состава La_2PtO_4, расположенные на координатных осях, подобные цепочкам в соединениях $(La, Sr)_2(Cu, Pt)O_4$, со структурами типа K_2NiF_4. Цепочки образованы правильными Pt-октаэдрами с межатомными расстояниями Pt-O=1,956(6)Å, и в отличие от цепочек с вытянутыми (Pt,Cu)-октаэдрами не являются электронейтральными. Избыточные заряды компенсируются дополнительными правильными (Pt,Cu)-октаэдрами, где межатомные расстояния составляют (Pt,Cu)-O=2,042(9)Å, и зарядами (La,Sr)- полиэдров. Pt–октаэдр связан с La-девятивершинником только кислородными вершинами Остальные полиэдры связаны как кислородными вершинами, так ребрами и плоскостями граней. Структура нового окисла носит каркасный характер в отличие от волокнистого типа подобных соединений с Cu-октаэдрами.

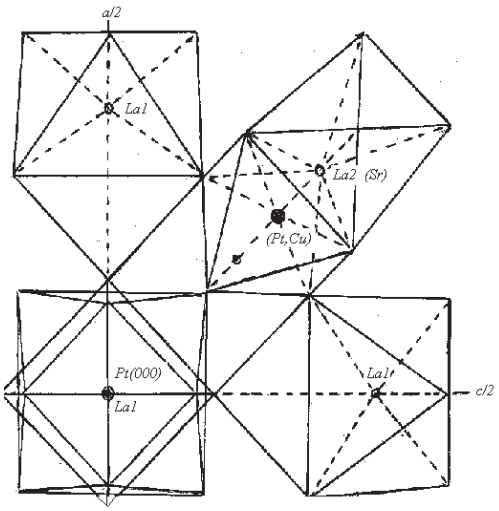
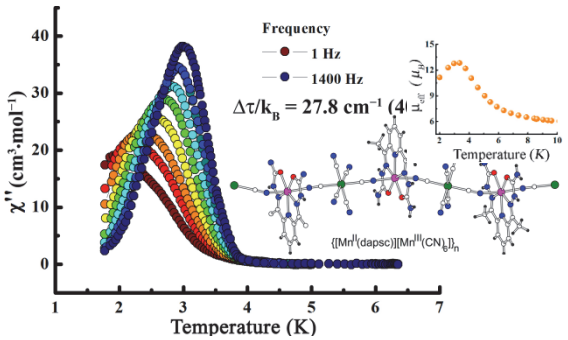


Рис. Проекция структуры на плоскость симметрии (PtLa1La2). Сплошные линии обозначают направления O-O, пунктирные – Pt-O и La-O

СЕМИКООРДИНАЦИОННЫЕ КОМПЛЕКСЫ M(dapsc) КАК ПЛАТФОРМА ДЛЯ СОЗДАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТОВ

Зорина Л.В.,[1] Засновская В.Д.,[2] Копотков В.А.,[2] Таланцев А.Д.,[2] Моргунов Р.Б.,[2] Ягубский Э.Б.,[2] Симонов С.В.,[1] Миронов В.С.[3]
[1]*Институт физики твердого тела РАН*
[2]*Институт проблем химической физики РАН*
[3]*Институт кристаллографии им. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: zorina@issp.ac.ru

В реакциях $[Mn^{II}(dapsc)Cl_2]\cdot H_2O$ с $K_3[Mn^{III}(CN)_6]$ были получены первые цепочечные молекулярные магниты (SCM = single-chain magnets) на основе [Mn(II)(dapsc)] (dapsc = 2,6-диацетилпиридин-бис(семикарбазон)): $\{[Mn^{II}(dapsc)][Mn^{III}(CN)_6]$-$[K(H_2O)_{2.85}(MeOH)_{0.5}]\}_n\cdot 0.4n(H_2O)$ (**I**) (быстрая кристаллизация) и $\{[Mn^{II}(dapsc)][Mn^{III}(CN)_6][K(H_2O)_2(MeOH)_2]\}_\infty$ (**II**) (медленная кристаллизация). Оба комплекса имеют цепочечное строение: бесконечные цепочки построены из чередующихся катионных $[Mn^{II}(dapsc)]^{2+}$ и анионных $[Mn^{III}(CN)_6]^{3-}$ фрагментов (рис.). Магнитные центры Mn^{II} ($S = 5/2$) и Mn^{III} ($S = 1$) связаны вдоль цепочки цианидными мостиками. Статические и динамические магнитные измерения были проведены на поликристаллическом образце **I** и свидетельствуют о SCM поведении комплекса, энергетический барьер составляет ~ 40 K. Общий характер зависимости μ_{eff} от T указывает на антиферромагнитное взаимодействие между спинами Mn^{II} and Mn^{III} (константа Вейса $\theta = -30.0$ K). Быстрый рост μ_{eff} ниже 10 K говорит о ферримагнитном упорядочении вдоль цепочки, падение ниже 2 K связано скорее всего с антиферромагнитным упорядочением между цепочками. Расчеты методом DFT показывают, что в присутствии аксиальных заместителей (в нашем случае CN-лигандов) стабилизируется плоская структура dapsc. Пентагональная экваториальная координация 4d или 5d металла способствует размораживанию орбитального момента, в этом случае спин-орбитальное взаимодействие приводит к сильной магнитной анизотропии. Именно поэтому M(dapsc) комплексы переходных металлов являются особенно перспективными для создания SCM.



ЧАНАБАЯИТ И ЕГО ПРОТОФАЗА: МИНЕРАЛЫ С ТРИАЗОЛЯТНЫМ АНИОНОМ

Зубкова Н.В.[1], Чуканов Н.В.[2], Пеков И.В.[1], Пущаровский Д.Ю.[1], Гистер Г.[3], Япаскурт В.О.[1], Лыкова И.С.[1], Мён Г.[4]

[1] *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический ф-т*

[2] *Институт проблем химической физики РАН*

[3] *Institute of Mineralogy and Crystallography, University of Vienna*

[4] *Dr J. Wittemannstrasse 5, 65527 Niedernhausen, Germany*

e-mail: n.v.zubkova@gmail.com

Чанабаяит $Cu_2(N_3C_2H_2)_2Cl(NH_3,Cl,H_2O,\square)_4$ [1] и его протофаза $NaCu_2Cl_3[N_3C_2H_2]_2[NH_3]_2\cdot 4H_2O$ [2] из месторождения гуано Пабельон-де-Пика, пров. Икике, Чили, – единственные изученные на сегодняшний день минералы с 1,2,4-триазолятным анионом $C_2N_3H_2^-$. Оба являются представителями новых структурных типов, родственных между собой. В их структурах основной структурный блок построен из зигзагообразных цепочек, соединенных по вершинам октаэдров $Cu(1)N_4Cl_2$, соединенных с изолированными октаэдрами Cu(2) [$Cu(2)N_2A_4$ в чанабаяите, где A = (NH_3),(H_2O),(OH),Cl, и $Cu(2)N_2(NH_3)_2Cl_2$ в его протофазе] через 1,2,4-триазолятные анионы $C_2N_3H_2^-$ (рис. 1). Каждый атом N триазольного кольца связан с Cu. Чанабаяит – безнатриевый минерал, а в его протофазе зафиксированы цепочки реберно-сочлененных октаэдров $Na(H_2O)_6$, соединенные с основным структурным блоком системой Н-связей. Чанабаяит образовался в результате выщелачивания Na и Cl и частичной дегидратации его протофазы с сохранением основного структурного блока.

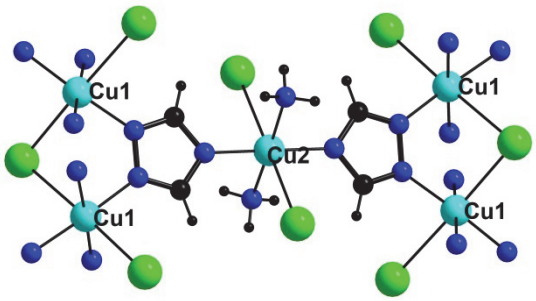


Рис.1. Фрагмент основного структурного блока в протофазе чанабаяита.

Некоторые переходные элементы (Cu, Zn, Fe и др.) проявляют ярко выраженное сродство к триазолятному аниону и обычно содержат дополнительный лиганд, стабилизирующий структуру. В чанабаяите и его протофазе эту роль выполняют NH_3 и Cl^-.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 14-17-00048.

[1] Чуканов Н.В., Зубкова Н.В. и др. // ЗРМО, 2015, № 2, с. 36-47.

[2] Zubkova N.V., Chukanov N.V. et al. // Zeit. Krist., 2016, V.231, № 1, p. 47-53.

МОДЕЛЬ Λ-ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КЛАСТЕРОВ ПРИ КОНДЕНСАЦИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК ZNO ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ОСАЖДЕНИИ

Ивонин М.Н., Агеев О.А.

Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета

e-mail: michael24kobe@gmail.com

Одним из наиболее гибких способов создания дискретных наноструктур является вакуумная конденсация на поверхность твёрдого тела [1]. Для расчёта режимов формирования структур элементов приборов микро- и наноэлектроники не всегда приемлемо пользоваться макроскопическими параметрами твёрдых тел. Начальная стадия фазовых превращений определяет физическую сущность метода получения структуры, поэтому вопрос о кинетических закономерностях кластерообразования при конденсации является актуальным.

Целью работы является создание модели Λ-взаимодействия для описания нуклеации кластеров в докритической метастабильной области заполнения поверхности плёнкой.

В рамках модели предложена классификация кластеров по типу, в зависимости от скорости распада при нуклеации (рисунок 1). Модель позволяет более точно, чем больцмановское распределение [1,2], описать кинетику процесса конденсации, учитывая испарение адатомов, разный размер кластеров с определённым критическим размером и наиболее полно описывая вероятность захвата отдельных атомов кластерами из потока. Также распределение модели учитывает вероятностный эффект распада кластера при росте, что позволяет учитывать факт, что коалесценция протекает для разных кластеров с разной скоростью.

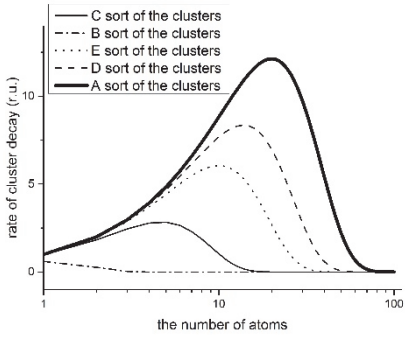


Рис.1. Классификация кластеров в зависимости от числа атомов.

Таким образом, в работе предложена модель взаимодействия кластеров, результаты которой могут быть использованы при разработке режимов формирования элементов микро- и наноэлектроники методом импульсного лазерного осаждения.

[1] Иевлев В.М., Шведов Е.В. // Физика твёрдого тела, 2006, том 48, вып. 1, с 133-138.

[2] Ивонин М.Н. // Сборник трудов XV Школы молодых ученых “Актуальные проблемы физики”, 2014, с 118-119.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ЦЕОЛИТОВ: ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПРОЦЕССЫ РОСТА И МОРФОГЕНЕЗИС

Илюшин Г.Д.[1,2], Блатов В.А.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Самарский университет*
e-mail: ilyushin@mail.ru

До настоящего времени, геометрические модели морфогенезиса монокристаллов неорганических соединений не были связаны с особенностью их атомного строения. В работе рассматривается новая геометрическая модель роста нанокристаллов, в которой морфогенезис определен расположением центров тяжести кластеров, образующих упаковки при образовании кристаллических структур. В большинстве случаев такие нанокристаллы представляют собой плотно-упакованные структуры с типичными кластерными координационными числами (ККЧ), равными 12 и 14. Новой топологической характеристикой кристаллических структур неорганических соединений является тип базовой сетки, в которой узлы соответствуют центрам тяжести кластеров, а ребра – характеризуют связи между кластерами. В случае кластер-ассамблированных кристаллических структур это сетки Cu-ГЦК и Mg-ГПУ с ККЧ=12 и Fe-ОЦК с ККЧ=14. Задача моделирования роста нанокристалла заключается в выделении неорганических 3D кластеров, образующих упаковки и определении типа базисной сетки кристаллической структуры.

В качестве объектов исследования были выбраны кристаллические структуры 225 топологически различных цеолитов [1]. Топологической моделью строения 3D каркасов цеолитов являются трех-периодические, 4-координированные 3D Т-сетки. Трехмерные 3D сетки цеолитов топологически могут быть определены перечислением комплементарных полиэдрических тайлов T_n, где n - число тетраэдрических Т-узлов [1]. Тайлы T_n характеризуют все полиэдрические полости цеолитов и формируют нормальное («грань к грани») разбиение кристаллического пространства. Топологический тип 3D каркаса цеолита определяется набором 3D тайлов. Самыми большими тайлами в цеолитах являются t-fau, t-wou и t-vsr, которым соответствуют полиэдры с 48 Т-узлами в каркасе FAU, 60 Т-узлами в каркасе EMT и 90 Т-узлами в каркасе TSC. Такие большие тайлы характеризуют уникальность структурных типов этих цеолитов. Предполагалось, что образование и рост цеолитов с большими тайлами осуществляется с участием больших 3D нанокластеров-прекурсоров.

Проведено комбинаторно-топологическое моделирование упаковок из симметрически связанных нанокластеров T_{48} (диаметр ~ 16 Å, симметрия -43m). Упаковки представляют собой 1D цепи S_3^1 и 2D микрослои S_3^2, из которых образуются 3D структуры S_3^3. Для трех из пяти каркасных структур установлено соответствие с цеолитом FAU (Faujasite, F d -3 m, Z = 4 T_{48}), EMT (P 6_3/m m c, Z = 2 T_{48}) и TSC (Tschortnerite $Fm\bar{3}m$, Z = 8 T_{48}). При моделировании элементарных процессов роста в виде последовательности стадий образования нанокристаллических структур цеолитов использованы методы комбинаторно-топологического анализа (пакет программ ToposPro), основанные на построении базисной 3*D*-сетки структуры цеолита в виде графов, узлы которого соответствуют положению центров тяжести кластеров T_{48}. Для FAU базисная 3D сетка соответствует кубической структуре Cu (ККЧ=12), для EMT - гексагональной структуре Mg (ККЧ=12) и TSC - кубической структуре Po (ККЧ=6). Восстановлен симметрийно-топологический код формирования нанокристаллических структур цеолитов в виде последовательности значимых элементарных событий, характеризующих самую короткую (быструю) программу конвергентной кластерной самосборки. Установлена функциональная роль темплатных молекул 15-Crown-5 и 18-Crown-6, стабилизирующих первичные цепи и микрослои каркасов FAU и EMT. Модель кластерной самосборки 3D структур из кластеров T_{48} объясняет морфогенезис монокристаллов FAU с образованием правильных октаэдров, EMT –гексагональных призм, TSC - правильных кубов.

Проведено комбинаторно-топологическое моделирование упаковок из симметрически связанных полиэдрических кластеров T_{12} (гексагональных призм), наиболее часто встречающихся в кристаллических структурах цеолитов. Упаковки из кластеров T_{12} представляют собой периодические 1D-цепи (11 типов) и 2D-микрослои (15 типов). Проведен отбор 2D-микрослоев, которые могут участвовать в самосборке 3D-структур цеолитов. С использованием компьютерных методов (пакета программ ToposPro, поиск кристаллической структуры по заданной локальной области) из 11 полученных моделей 3D-каркасов для семи установлено соответствие с цеолитами CHA(Chabazite $Ca_6(H_2O)_{40}Al_{12}Si_{24}O_{72}$), AEI(AlPO-18, $Al_{24}P_{24}O_{96}$), SAV ($((C_{18}H_{42}N_6)_2(H_2O)_7Mg_5Al_{19}P_{24}O_{96})$, KFI ($Na_{30}(H_2O)_{98}Al_{30}Si_{66}O_{192}$), GME (Gmelinite, $(Ca,Na)_4(H_2O)_{24}Al_8Si_{16}O_{48}$), AFX (SAPO-56, $H_3Al_{23}Si_5P_{20}O_{96}$) и AFT (AlPO-52, $Al_{36}P_{36}O_{144}$). При моделировании 3D-политипов семейства GME (1L-тип)–AFX (2L-тип)–AFT (3L-тип) был установлен новый 3L-политип: a = 13.75, c = 30.00 Å, V = 4912.0 Å^3, пр. гр. $P\bar{6}m2$ (№ 187). Анализ локальных взаимодействий показал, что при 2D-самосборке известных структур цеолитов происходит связывание всех кластеров T_{12} + T_{12} с образованием между ними 4Т-колец и число связей между комплементарными цепями при образовании микрослоев является максимальным. Во всех трех типах полученных каркасов, не имеющих аналогов среди цеолитов, имеет место пониженная связанность первичных цепей при образовании микрослоя.

[1] Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D. M. // Chem. Mater., 2013, vol. 25, no. 3, pp. 412-424.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КАРБИДА КРЕМНИЯ 6H SiC, ОБОГАЩЕННОГО ПО ИЗОТОПУ ^{28}Si

Инюшкин А.В.[1], Талденков А.Н.[1], Чумаков Н.К.[1], Якубовский А.Ю.[1], Емельянов А.В.[1], Гавва В.А.[2], Гибин А.М.[2], Мохов Е.Н.[3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН

[3] Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН

e-mail: Inyushkin_AV@nrcki.ru

Карбид кремния (SiC) является перспективным материалом для электроники, оптоэлектроники и для будущих твердотельных квантовых технологий. Высокая теплопроводность - один из ключевых параметров кристаллов SiC. Для SiC современная теория теплопроводности предсказывает ее 20% рост при комнатной температуре [1] в моноизотопном кристалле по сравнению с кристаллом природной изотопной композиции ^{nat}SiC. Одна из целей работы состояла в экспериментальном подтверждении этого теоретического предсказания.

В настоящей работе сублимационным сэндвич-методом впервые в мире был синтезирован объемный монокристалл SiC (политип 6H) с высоким обогащением по изотопу ^{28}Si (99.993%). Впервые проведены измерения теплопроводности и намагниченности моноизотопного кристалла ^{28}SiC и кристалла сравнения ^{nat}SiC, выращенных при одинаковых условиях. Согласно нашим измерениям теплопроводность моноизотопного ^{28}SiC существенно выше, чем у ^{nat}SiC в широком интервале температур. При комнатной температуре этот «изотопический эффект» составляет 20-25%, что свидетельствует о значительном вкладе рассеяния фононов на примесных изотопах в кристалле ^{nat}SiC.

Результаты измерения намагниченности монокристаллов SiC в постоянном магнитном поле указывают на существование во всех образцах трех вкладов: ферромагнитного, диамагнитного и парамагнитного. На основе анализа температурных ($2 < T < 300$ К) и полевых ($H < 7$ Тл) зависимостей удалось разделить эти вклады и оценить концентрации спинов, находящихся в парамагнитном состоянии - $(7\text{-}10)\times10^{17}$ см$^{-3}$.

[1] Lindsay L., Broido D. A., Reinecke T. L. // Phys. Rev. B, 2013, vol. 87, № 16, 165201.

МЕХАНИЗМ ДЕФОРМАЦИИ LOS- И SOD-КАРКАСА В МИНЕРАЛАХ

Канева Е.В., Сапожников А.Н.

ФГБУН Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН

e-mail: kev604@mail.ru

Цель работы - определение механизма уменьшения объема ячейки минералов подгруппы быстрита при охлаждении до 100° К.

Низкотемпературные данные для быстрита и сульфгидрилбыстрита из Малобыстринского месторождения (Ю-З Прибайкалье) получены на дифрактометре AXS D8 VENTURE Bruker с использованием приставки Bruker Cobra nitrogen Cryostat.

Уменьшение объема элементарной ячейки минералов при охлаждении определяется, главным образом, увеличением дитригональности (сжатием) шестерных колец каркаса, при этом в большей степени деформируются наклонные кольца, в меньшей – горизонтальные. Аналогичный механизм деформации наблюдается при изменении химического состава: замещение двух атомов Na на два более крупные атома K сопровождается увеличением объема ячейки и уменьшением дитригональности колец в структуре. Связь между величиной дитригональности и объемом ячейки отчетливо проявляется при сравнении полученных результатов с данными для карбобыстрита [1]: замена анионного комплекса S_5 на (CO_3+3H_2O) и цепочки –Ca–Cl– или –Ca–SH– на –Na–H_2O– приводит к более высокой степени сжатия колец и уменьшению объема ячейки карбобыстрита.

Результаты сравнения деформации каркаса минералов подгруппы быстрита при охлаждении и каркаса содалита при нагревании (по данным [2]) позволяют утверждать, что механизмы деформации одинаковы и, главным образом, определяются дитригонализацией шестерных тетраэдрических колец.

Работа выполнена с использованием научного оборудования ЦКП «Изотопно-геохимических исследований» ИГХ СО РАН и “Анализа органического вещества” ИрИХ СО РАН при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-35-00137 мол_а

[1] Khomyakov A.P., Càmara F. et al // Canadian Mineralogist, 2010, vol. 48, p 291-300.

[2] Hassan I., Antao S.M. et al // American Mineralogist, 2004, vol. 89, p 359-364.

НЕИЗОТРОПНОЕ ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ПОЛИРОВАННЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ

Каплунов И.А., Колесников А.И., Ляхова М.Б.,
Гречишкин Р.М., Третьяков С.А., Айдинян Н.В., Кутузов Д.С.
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
e-mail: Kaplunov.IA@tversu.ru

Исследованы особенности индикатрис лазерного оптического отражения монокристаллов парателлурита и германия с поверхностями, отполированными по максимальным классам чистоты и имеющими минимальную шероховатость. Экспериментально установлено, что при определённых условиях в индикатрисе отражения лазерного пучка от полированных поверхностей оптических кристаллов возникают узкие полосы, отходящие от центрального пятна, яркость которых может многократно превышать средний уровень фоновой составляющей. В ходе экспериментов, при которых освещаемый кристалл поворачивался вокруг оси падающего пучка, и полосы синхронно поворачивались на тот же угол вместе с ним, стало ясно, что эффект связан исключительно со структурой полированной поверхности кристалла.

На поверхностях хорошо отполированных монокристаллов парателлурита и германия наблюдается неизотропное отражение лазерного света с резкими максимумами в виде полос, вытянутых в направлениях, определяемых плоскостями спайности и остаточными нанонеровностями поверхности этих кристаллов. Наблюдаемые закономерности могут быть объяснены в рамках классической геометрической оптики в предположении её применимости при размерах неоднородностей, намного меньших длины волны света. В остаточном рельефе обработанной поверхности присутствуют микро- и наноучастки, плоскости которых совпадают с плоскостями спайности, что является причиной для неизотропного отражения слабо расходящихся лазерных пучков, падающих на полированный кристалл. Рассмотренные аномальные эффекты неизотропного отражения могут быть использованы при разработке устройств лазерной техники и в качестве чувствительного метода контроля качества поверхности оптических материалов.

Работа выполнена в Тверском государственном университете при поддержке Минобрнауки в рамках реализации Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы», Соглашение 14.574.21.0113 (RFMEFI57414X0113).

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СТРУКТУР

Каплунов И.А.[1], Туровцев В.В.[1,2], Орлов Ю.Д.[1]
[1] ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
[2] ГБОУ ВПО «Тверской государственный медицинский университет»
e-mail: Kaplunov.IA@tversu.ru

В последнее время в связи с развитием квантовых методов и компьютерной техники наметился значительный прогресс в теоретическом изучении структуры веществ. С одной стороны, большое количество кватовохимических моделей дает определённую гибкость, что позволяет использовать оптимальное сочетание метод/базис при изучения нужных свойств, а с другой, такое разнообразие обязательно требует на начальном этапе любого теоретического исследования калибровки. Калибровка подразумевает проведение менее ресурсоемких квантовохимических расчетов с целью определения погрешностей доступных методов.

Нами проводится работа по изучению кристаллического германия и его кислородсодержащих соединений. Внедрение атомов кислорода является основным источником дефектов структуры, поэтому изучение состояния и свойств атомарного кислорода в германии представляет собой актуальную задачу. Анализ погрешностей применения методов функционала плотности (DFT) к воспроизведению свойств вещества требует проведения расчетов вблизи вариационного предела с минимизацией ошибок численных процедур. Нами были проведены расчеты геометрического строения, частот колебаний, дипольного момента и термодинамических свойств GeO и GeO_2 в декартовых базисах слетеровых функций QZ4P, aug-TZ2P и TZ2P в два этапа: а) с учетом релятивистской поправки ZORA и б) без учета поправки методами B1LYP, B1PW91, B3LYP, BHandH, BHandHLYP, BLYP, BP, CAMY-B3LYP, HF, HTBS, KMLYP, LCY-BLYP, LCY-BP86, LCY-PBE, LDA, M06, M06-2X, M06-HF, M06L, mPBE, mPW, MPW1K, MPW1PW, O3LYP, OLYP, OPBE, OPBE0, PBE, PBE0, PBEsol, PW91, revPBE, revTPSS, RPBE, TPSS, TPSSH, X3LYP. Было показано, что наиболее приемлемые результаты можно получить с использованием OPBE, revTPSS, PBEsol, LDA, TPSS, M06L, HTBS, TPSSH.

Работа выполнена в Тверском государственном университете при поддержке Минобрнауки в рамках реализации Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы», Соглашение 14.577.21.0004 (RFMEFI57714X0004).

МИКРОСТРУКТУРА НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ Eu И Sr НА ПОДЛОЖКАХ Si

Каратеев И.А., Каратеева К.Г., Аверьянов Д.В., Королёва А.Ф., Токмачев А.М., Парфёнов О.Е., Талденков А.Н., Сторчак В.Г., Васильев А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: iakarateev@gmail.com

Материалы на основе Eu и Sr перспективны для использования в спинтронике и наноэлектронике. Формирование пленок EuO на подложках Si позволяет совместить материалы спинтроники с кремниевыми технологиями. До сих пор сопряжение в большинстве случаев вызывало образование промежуточных аморфизованных или поликристаллических слоев силицидов и силикатов Eu. Такие слои на границе раздела EuO/(001)Si могут препятствовать спиновой инжекции в Si. Для создания бездефектной границы требуется пассивация поверхности Si субатомными слоями Eu. Методами просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) обнаружены 2 типа двумерных поверхностных фаз: с реконструкцией 2x1 (известна ранее) и новая поверхностная фаза 5x1, более насыщенная Eu. Ее формирование позволило сформировать резкую бездефектную границу раздела EuO/(001)Si (Рис. 1). По данным высокоразрешающей ПЭМ, ПРЭМ и электронной дифракции определена кристаллическая структура пленки: пространственная группа $Fm\bar{3}m$ с параметром элементарной ячейки a=5,14 Å. Методом спектроскопии потерь энергии электронов подтверждено, что валентность Eu в пленке составляет +2.

В результате исследования силицидов $SrSi_2$ и $EuSi_2$ наряду с известными фазами, имеющими кубическую и тетрагональную сингонии, обнаружены новые фазы $SrSi_2$ и $EuSi_2$: пространственная группа $P\bar{3}m1$, параметры ячейки в гексагональном представлении $SrSi_2$ – a=3,97 Å, c=5,13 Å, $EuSi_2$ – a=3,90 Å, c=4,92 Å.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 16-07-00204 и 16-29-03027) и РНФ (грант 14-19-00662).

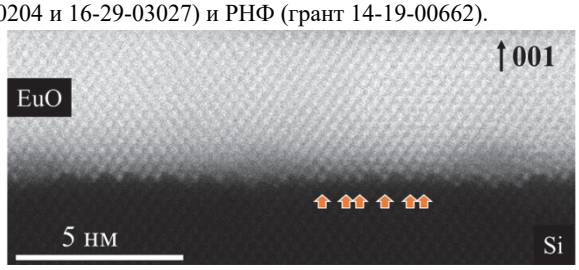


Рис. 1. Темнопольное ПРЭМ изображение эпитаксиальной интеграции EuO на Si, стрелками обозначены следы реконструкции поверхности 5x1 (Titan 80-300).

5x1 И 2x1 СВЕРХСТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ (001) Si

Каратеева К.Г., Каратеев И.А., Аверьянов Д.В., Токмачев А.М., Сторчак В.Г., Васильев А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: listina_13@mail.ru

При формировании ряда окислов на кремнии, в частности Eu и Sr, на первом этапе для пассивации поверхности необходимо добиться образования атомарного слоя металла на поверхности Si. При этом атомы металла на поверхности (001) Si могут образовывать сверхструктуры, связанные с перестройкой поверхности. Наиболее часто встречающаяся сверхструктура - 2x1. В представленной работе изучена кристаллическая структура реконструированных поверхностей (001)Si, получаемых при осаждении Eu и Sr.

Исследования проведены на просвечивающем/растровом электронном микроскопе Titan 80-300 (FEI, США), оборудованном корректором сферической аберрации пробы и кольцевым темнопольным высокоугловым детектором электронов при ускоряющем напряжении 300 кВ. Образцы для просвечивающей электронной микроскопии были приготовлены с помощью ФИП (фокусированного ионного пучка). На поверхность образцов в ростовой камере установки молекулярно-лучевой эпитаксии напылялся поликристаллический алюминий для защиты от окисления.

Как оказалось, атомы Eu и Sr формируют на поверхности не только сверхструктуру типа 2x1 (Рис.1 а), но и 5x1(Рис.1 б). Реконструкция поверхности (001)Si типа 5x1 ранее не была изучена и ее атомная структура не была определена. Обнаружено, что сверхструктуры 5x1 для Eu и Sr одинаковы. Участок такой реконструированной поверхности также представлен на вставке Рис.1 б.

Работа частично выполнена на оборудовании Ресурсного Центра Зондовой и Электронной микроскопии (Курчатовский Комплекс НБИКС-технологий, НИЦ «Курчатовский институт») при поддержке грантов РФФИ 16-07-00204, РФФИ 16-29-03027 и РНФ 14-19-00662.

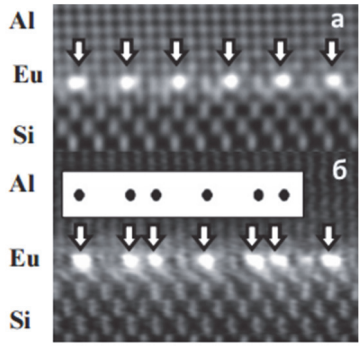


Рис.1. Темнопольные ПРЭМ изображения поперечных срезов с перестройкой поверхности: (а) – 2x1 Eu/Si, (б) – 5x1 Eu/Si.

ВЫРАЩИВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА В СИСТЕМЕ SrF_2 – EuF_2

Каримов Д.Н.[1], Ильина О.Н.[1], Сульянова Е.А.[1], Косова Т.Б.[1], Ивановская Н.А.[1], Попов П.А.[2], Соболев Б.П.[1]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *ФГБОУ ВО «Брянский государственный университет имени академика И.Г. Петровского»*
e-mail: dnkarimov@gmail.com

В системе SrF_2 - EuF_2 образуется непрерывный твердый раствор, кристаллизующийся в структурном типе CaF_2 (пр.гр. *F*m-3m). Кристаллы $Sr_{1-x}Eu_xF_2$ представляют интерес для магнитооптики, радиационной физики, ионики твердого тела и др., однако условия их получения и свойства изучены недостаточно из-за склонности Eu^{2+} к окислению до Eu^{3+} [1].

В работе впервые изучены оптические, спектроскопические и теплофизические свойства кристаллов номинального состава $Sr_{1-x}Eu_xF_2$ (x = 0 - 1). Кристаллы выращивали из расплава методом Бриджмена (фторирующий агент NH_4F*HF). В качестве исходных реактивов использовали SrF_2 и EuF_2, полученный восстановлением EuF_3 кремнием.

Содержание EuF_3 не превышало 10-15 мол. % для кристаллов с x = 1 и подтверждается спектроскопически (наличие полос поглощения в диапазоне 2 – 7 мкм, связанные с переходами $^7F_0 \rightarrow {}^7F_j\ 4f^6$ конфигурации Eu^{3+}).

С ростом x параметр решетки a кристаллов $Sr_{1-x}Eu_xF_2$ слабо квадратично изменяется в диапазоне 5.8000 – 5.8217 Å, а пикнометрическая плотность и показатель преломления n_D увеличиваются линейно в диапазоне 4.275 – 6.400 г/см^3 и 1.438 – 1.558, соответственно (рис. 1).

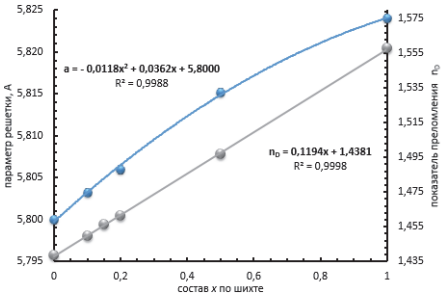


Рис.1. Концентрационная зависимость параметра решетки и показателя преломления кристаллов $Sr_{1-x}Eu_xF_2$.

Коротковолновый край пропускания кристаллов, определяемый поглощением Eu^{2+} с ростом x смещается в длинноволновую область до 500 нм.

Коэффициент теплопроводности $Sr_{1-x}Eu_xF_2$ при комнатной температуре уменьшается от значения 9.3 Вт/(м·К) для x = 0 до 2.1 Вт/(м·К) для x = 1, что определяется комбинацией изо- и гетеровалентного ионного замещения в кристаллах данного типа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-03-00707.

[1] Соболев Б.П., Туркина Т.М., Сорокин Н.И. и др. // Кристаллография, 2010, том 55, № 4, с 702–705.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПИИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ ФТОРИДА ТЕРБИЯ

Каримов Д.Н.[1], Сизова Н.Л.[1], Соболев Б.П.[1], Лисовенко Д.С.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *ФГБУН Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН*
e-mail: dnkarimov@gmail.com

Парамагнитные кристаллы с эффективным магнитооптическим вращением представляют интерес как фарадеевские изоляторы для лазерных устройств. Кристаллы TbF_3 имеют высокую концентрацию ионов Tb^{3+}, составляющую n ~ 2*10^{22} см$^{-3}$, что позволяет рассматривать их как перспективный магнитооптический материал. Фторид тербия со структурой β-YF_3 не обладает полиморфным превращением вплоть до температуры плавления и его объемные кристаллы можно получить расплавными методами. Низкая симметрия решетки кристаллов TbF_3 (пр.гр. *P*nma) приводит к значительной анизотропии физических свойств, изучение которых является актуальной научной и прикладной задачей.

Кристаллы TbF_3 получены методом вертикальной направленной кристаллизации во фторирующей атмосфере. В работе впервые исследована анизотропия упругих и механических характеристик кристаллов TbF_3.

Значения модуля Юнга (E) кристаллов меняются от 85.1 ГПа (для [001]) до 166 ГПа (для [101]). Анализ изменчивости коэффициента Пуассона (ν) показывает, что TbF_3 является частичным ауксетиком [1], минимальное значение $\nu_{[00.1],[010]}$ = – 0.01. Модуль сдвига G для плоскости (100) изменяется в пределах от 41.7 ГПа до 67.1 Гпа. Его максимальное значение будет достигаться при направлении скольжения [001].

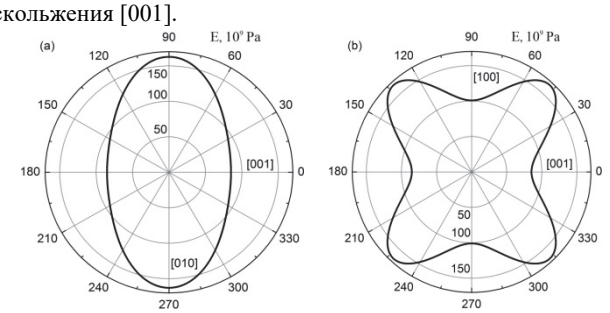


Рис.1. Ориентационная зависимость модуля Юнга для плоскостей (100) (a) и (010) (b).

Величины микротвердости (HV) по Виккерсу плоскостей (010) и (100) кристалла TbF_3, измеренные на приборе ПМТ-3 в интервале нагрузок P = 50 – 100 г, меняются от 6.4 до 5.7 ГПа для (010) и от 4.4 до 3.5 ГПа для плоскости (100). Форма отпечатков индентора соответствуют симметрии модуля Юнга для этих плоскостей (рис. 1).

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН №1 V.4.11.

[1] Лисовенко Д.С. // Деформация и разрушение материалов, 2011, № 7, с 1-10.

ФТОР-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ $EuF_{2.136}$ (ТИП CaF_2) И EuF_3 (ТИП β-YF_3)

Каримов Д.Н., Сорокин Н.И., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Флюоритовые фазы $M_{1-x}R_xF_{2+x}$, в которых в качестве катионов M^{2+} и R^{3+} выступают редкоземельные элементы с переменной валентностью, являются перспективными материалами радиационного оптического материаловедения, систем оптической записи информации и твердотельной ионики. Целью работы является получение из расплава кристаллов EuF_{2+x}, экспериментальное исследование их электропроводности, сравнение характеристик фтор-ионной проводимости кристаллов EuF_{2+x} (тип CaF_2) и EuF_3 (тип β-YF_3).

Шихту EuF_{2+x} синтезировали спеканием при 900 °С реактива EuF_3 (чистота 99.99 %) и Si. Восстановление EuF_3 (> 70 мол. %) до EuF_2 приводит к смене структурного типа от β-YF_3 (EuF_3) к типу CaF_2 (EuF_{2+x}). Кристаллы получены из расплава методом Бриджмена, в кристалле EuF_{2+x} концентрация EuF_3 (по параметру решетки) составляла 13.6 мол. % [1]. Керамический образец EuF_3 приготовлен прессованием с последующим отжигом во фторирующей атмосфере. Объемную проводимость σ_{dc} кристаллов определяли методом импедансной спектроскопии (5–5×10^5 Гц, вакуум, 684–929 К). Погрешность σ_{dc} < 5 %. Блокирующий эффект от инертных (Ag) электродов в спектрах импеданса указывает на ионную природу σ_{dc}.

На рис.1 показаны зависимости $\sigma_{dc}(T)$ кристаллов EuF_3 (кривая *1*) и $EuF_{2.136}$ (кривая *2*). Энтальпия активации ионного переноса в кристалле EuF_3 ΔH_σ = 1.39 эВ при 697-929 К. Носителями заряда являются термические вакансии V_F^+.

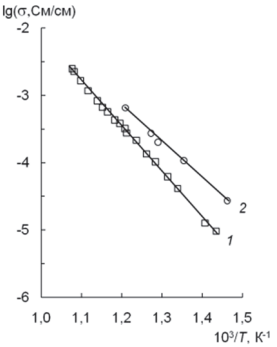


Рис. 1. Температурная зависимость ионной проводимости кристаллов EuF_3 (*1*) *и* $EuF_{2.136}$ (*2*).

В кристалле $EuF_{2.136}$ ΔH_σ = 1.13 эВ при 684-828 К. Носителями заряда являются междоузельные F_{int}^-: $Eu^{2+} \rightarrow Eu^{3+} + F_{int}^-$. Проводимость при 500 °С $\sigma_{dc} = 2.2\times10^{-4}$ См/см кристалла $EuF_{2.136}$ в 2.5 раза выше кристалла EuF_3.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-03-00707.

[1] Попов П.А., Моисеев Н.В. и др. // Кристаллография, 2015, том 60, № 5, с 806–809.

САМООРГАНИЗАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СЕМЕЙСТВА ГРАНАТА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ИХ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО. МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ.

Каурова И.А.[1], Кузьмичева Г.М.[1], Подбельский В.В.[2], Плесовских А.И.[2]
[1] *Московский технологический университет*
[2] *НИУ «Высшая школа экономики»*
e-mail: kaurchik@yandex.ru

Улучшение структурного совершенства, расширение области применения и поиска новых композиций перспективных для применения в лазерной технике редкоземельных скандий-содержащих гранатов общего состава $\{A_3\}[B_x]^+(C_3)^+O_{12}$, соответственно, с додекаэдрической, октаэдрической и тетраэдрической координациями невозможно без знания истинного состава кристаллов, существенно отличающегося, в большинстве случаев, от состава исходной шихты, особенностей образования твердых растворов и механизмов сохранения устойчивости структуры.

Созданная программа «Моделирование динамики изменения структурных параметров соединений типа граната при вариации их состава» позволяет прогнозировать поведение межатомных расстояний и валентных углов во всех полиэдрах, углов преломления и поворота додекаэдра при изменении состава, оценить области устойчивости фаз всех композиций со структурой граната, выявить нереальные составы и предложить конгруэнтно-плавящиеся. Сопоставление моделей с экспериментом объясняет причины и механизмы самоорганизации системы образованием антиструктурных дефектов (состав шихты $\{Gd_3\}[Sc_2](Al_3)O_{12}\rightarrow$ состав кристалла $\{Gd_{2.70}Sc_{0.30}\}[Sc_{1.92}Gd_{0.08}](Al_3)O_{12}$), упорядочением катионов по позициям с изменением симметрии отдельных полиэдров (октаэдров GaO_6 и ScO_6 в структуре $\{Y_{2.97}Sc_{0.03}\}[Sc_{1.335}Ga_{0.665}](Ga_3)O_{12}$) или всего кристалла (пр. гр. *Pm*3*n* для гранатов в системе Yb-Sc-Ga-O). Предложены формулы оценки предельных составов додекаэдрической и октаэдрической позиций структуры фаз в системе *RE*-Sc-*M*(Al,Ga)-O (*RE*- редкоземельный металл) до начала перераспределения Sc по двум позициям.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00497.

НОВЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ФАЗЫ С ЦЕПОЧКАМИ ИЗ Mn-ОКТАЭДРОВ: ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛОХИМИИ

Кирюхина Г.В., Якубович О.В.
МГУ им. М.В. Ломоносова
e-mail: g-biralo@yandex.ru

Рентгенографически установлены кристаллические структуры новых соединений $Rb_2Mn_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ (I) и $KCuMn_3(VO_4)_3$ (II), полученных в гидротермальных условиях: (I) R = 0.0270, a = 9.374(2), b = 8.367(2), c = 9.437(2) Å, β = 99.12(2)°, пр. гр.. $P2_1/c$; (II) R = 0.0355, a = 12.396(1), b = 12.944(1), c = 6.9786(5) Å, β = 112.723(1)°, пр. гр. $C2/c$. Их анионные постройки смешанного типа образованы цепочками из Mn-октаэдров, делящих общие рёбра (рис.) и объединённых P/V-тетраэдрами в 2D-блоки (I) или 3D-каркас (II).

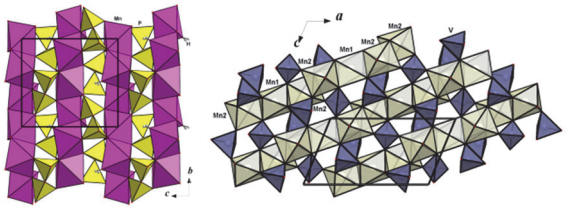


Рис. Цепочки из Mn-октаэдров в структурах $Rb_2Mn_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ (слева) и $KCuMn_3(VO_4)_3$.

В структуре $Rb_2Mn_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ 2D-блоки чередуются вдоль [100] с катионами Rb. $Rb_2Mn_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ является новым членом морфотропного ряда $A_2M_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ (A = K, NH_4, Rb, Na; M = Mn, Fe, Co, Ni), для которого выявлена зависимость между размерами M^{2+} катиона, параметра b и POP угла, обусловленная ключевой ролью атомов переходного металла и гибкостью анионного дифосфатного радикала. На основании топологического сходства структур предложена гипотеза получения $Rb_2Mn_3(H_2O)_2[P_2O_7]_2$ трансформацией минерала Mn-фаррингтонита по схеме: $2Mn_3(PO_4)_2 + 2RbOH + 4H_2O \rightarrow Rb_2Mn_3(H_2O)_2(P_2O_7)_2 + 3Mn(OH)_2$.

В структуре $KCuMn_3(VO_4)_3$ два типа туннелей вдоль [001] заселены атомами K и Cu. Новый ванадат относится к группе минералов и синтетических соединений, изоструктурных аллюодиту. Детализирована общая формула семейства: $A(1)A(1)'A(1)_x''A(2)A(2)'M(1)M(2)_2(TO_4)_3$ (T = P, As, V; M = Fe, Mn и др.; A = K, Na, Ca и H_2O), в котором выделены 3 главные подгруппы: йохиллерита, аллюодита и ящганита. Первая включает ванадаты и арсенаты с атомами Cu в позиции $A(1)'$. Подгруппа аллюодита объединяет фосфаты и арсенаты переходных и щелочных металлов и обычно содержит Na атомы в A позициях. Гидратированные фосфаты и арсенаты образуют подгруппу ящганита.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РОСТА КРИСТАЛЛОВ САПФИРА ИЗ РАСПЛАВА

Клунникова Ю.В., Малюков С.П.
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения
e-mail: yvklunnikova@sfedu.ru

Выращивание кристаллов сапфира из расплава для электроники с повышенным структурным совершенством стало первоочередной задачей современной науки и техники. Усовершенствование технологии выращивания крупногабаритных кристаллов сапфира требует увеличения производительности, снижения ее энергоемкости, повышения качества кристаллов, разработки методов контроля и управления процессами кристаллизации в реальном режиме времени.

Для достижения качественно нового уровня в понимании процессов кристаллизации сапфира использовались численные методы контрольных объемов и элементов.

На основании разработанных математических моделей установлены закономерности тепловых процессов при формировании кристаллов сапфира, которые позволяют определять температурные градиенты и термоупругие поля в зоне формирования кристаллов. Выявлены основные тенденции дефектообразования, контроля и анализа термоупругих напряжений, трещин и газовых пузырей в кристаллах сапфира, которые позволяют следить за изменением морфологии структуры и рассматривать динамику изменения дефектов в сапфире.

Проведены экспериментальные исследования по определению распределения дефектов в структуре сапфира. Результаты математического моделирования полностью согласуются с полученными экспериментальными данными.

Таким образом, разработанные математические модели процесса роста кристаллов сапфира из расплава могут быть использованы для усовершенствования технологии роста кристаллов сапфира. На основании полученных математических моделей выбраны оптимальные режимы выращивания кристаллов сапфира высокого структурного качества.

Работа выполнена в рамках проекта ФЦП Россия № 14.587.21.0025. Уникальный идентификатор проекта RFMEFI58716X0025.

ОСОБЕННОСТИ РОСТА НАНОВИСКЕРОВ Si:Au МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Конева У.Ю., Козлов А.А., Медведская П.Н., Гойхман А.Ю., Максимова К.Ю.
Балтийский Федеральный Университет им. И.Канта
e-mail: ukoneva@innopark.kantiana.ru

Структуры из самоорганизованных нанокристаллов (СНК) представляют большой интерес для приложений наноэлектроники. СНК позволяют преодолеть технологические ограничения, связанные с литографическими процессами и открывают возможности формирования гладких границ раздела материалов.

В работе представлены результаты экспериментов по формированию нановискеров (НВ) Si:Au методом импульсного лазерного осаждения. Высокая исходная энергия частиц в осаждаемой плазме материала позволяет подобрать оптимальные параметры роста, а также получить 3D наноструктуры заданной формы. Прецизионный контроль высоты НВ позволил исследовать стадии формирования СНК. Было проведено исследование влияния температуры подложки, уровня вакуума в ростовой камере, наличие буферных газов на рост кремниевых НВ. Исследование физических и морфологических свойств, выращенных образцов позволило выявить критические условия ростового процесса НВ.

Свойства НВ делают перспективными их применение в современных наноэлектронных и оптических устройствах – полевых транзисторах, диодах, химических и биологических сенсорах [1,2]. Отдельные Si-НВ применяются как зонды для атомно- силовой микроскопии, а регулярные ансамбли вискеров могут использоваться в качестве полевых острийных эмиттеров электронов и ионов [3], покрытий с управляемой смачиваемостью [4].

[1] J. Goldberger, A.I. Hochbaum, R. Fan, P. Yang. Nano Lett., 6 (5), 973 (2006).

[2] Y.C. Cui, Q. Wei, H. Park, C.M. Lieber. Science, 293, 1289 (2001).

[3] Е.И. Гиваргизов. Кристаллография, 51 (5), 947 (2006).

[4] J.-G. Fan, D. Dyer, G. Zhang, Y.-P. Zhao. Nano Lett., 4 (11), 2133 (2004).

ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ И ДИСКРЕТНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ В СИСТЕМАХ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ С ХИРАЛЬНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ

Котельникова Е.Н.[1], Исаков А.И.[1], Таратин Н.В.[1], Лоренц Х.[2]
[1] *СПбГУ*
[2] *MPI, Magdeburg, Germany*
e-mail: kotelnikova.45@mail.ru

В связи со слабой изученностью и практическим применением исследованы (РФА, РСА, ДСК и др.) твердые фазы в хиральных системах четырех типов.

Системы первого типа представлены R- и S-энантиомерами E3ClMA C10H14O4NCl и яблочной оксикислоты C4H6O5, их молекулы характеризуются одним хиральным центром и разными знаками оптической активности. Первая система является эвтектической [1], а во второй системе выявлены эквимолярные RS и неэквимолярные R1S3 и R3S1 дискретные соединения [2]. Обеим системам присущи ограниченные твердые растворы.

Система второго типа представлена L- и D-энантиомерами треонина C3H8O3N, их молекулы характеризуются двумя хиральными центрами и разными знаками оптической активности. Система является эвтектической, твердые растворы не выявляются. [3].

Система третьего типа представлена L- и L-allo-диастереомерами треонина C3H8O3N, их молекулы характеризуются двумя хиральными центрами и одинаковым знаком оптической активности. Системе присущи непрерывные твердые растворы [3].

Система четвертого типа представлена L-энантиомерами валина C5H11O2N и изолейцина C6H13O2N, их молекулы характеризуются разным количеством хиральных центров и одинаковым знаком оптической активности. Система характеризуется неэквимолярным дискретным соединением V2I и ограниченными твердыми растворами [4].

Работа выполнена с использованием оборудования РЦ «РДМИ» и «Геомодель» СПбГУ и поддержана грантами РФФИ (16-05-00837) и НИР 2/15 СПбГУ (3.38.243.2015).

[1] Taratin N.V., Lorenz H. et al. // Crystal Growth & Design, 2012, 12, с. 5882-5888.

[2] Исаков А.И., Kotelnikova E.N. et al. // Chem. Eng. Technol., 2015, 38, № 6, с. 1047-1052.

[3] Taratin N.V., Lorenz H. et al. // Crystal Growth & Design, 2015, 15, с. 137-144.

[4] Исаков А.И., Kotelnikova E.N. et al. // Crystal Growth & Design, 2016, 16, с. 2653-2661.

КОМПОЗИЦИОННАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛОВ АДП-КДП

Крючкова Л.Ю., Бочаров С.Н., Савельев С.О.
Институт наук о Земле СПбГУ
2106@list.ru

В последние десятилетия проявился интерес к получению смешанных кристаллов группы дигидрофосфата аммония-калия (АДП-КДП), в связи с наличием в них конкурирующих ферроэлектрических и антиферроэлектрических взаимодействий, приводящих к формированию спиновых стекол. При этом, несмотря на то, что ряд АДП-КДП относится к идеальным твердым растворам, получение крупных монокристаллов промежуточного состава крайне затруднено вследствие значительной разницы величин параметров *a* и *c* тетрагональных ячеек крайних членов этого ряда, а также особенности роста смешанных кристаллов, в первую очередь, из-за наличия в этом процессе метасоматической компоненты, выражающейся в одновременном росте и растворении участков, имеющих по отношению к раствору локально равновесный и локально неравновесный составы соответственно, которые обуславливают возникновение в объеме кристалла областей, различающихся по составу - композиционных микрокластеров, и, как следствие, возникновение напряжений гетерометрии и последующее развитие блочности и трещиноватости кристаллов. Нами выращены 17 смешанных монокристаллов из растворов со следующими содержаниями изоморфных компонентов ADP:KDP 95:5, 90:10, 80:20, 75:25, 70:30 и 60:40 вес.%. Распределение компонентов в полученных кристаллах изучено методами электронной микроскопии и компьютерной рентеновской микротомографии. Показано, что кристаллы, выращенные в растворах с содержанием KDP до 10 вес.%, характеризуются высоким качеством. Дальнейшее увеличение концентрации KDP в растворе до 25 вес.% приводит к появлению в кристаллах газово-жидких включений, а затем (KDP=40) и трещин. При этом в объеме кристаллов имеются области, свободные от трещин и включений и имеющие размеры, достаточные для изготовления оптических элементов.

Работа поддержана РФФИ (№16-2911727). Исследования выполнены в ресурсном центре СПбГУ «Геомодель».

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИОКСИДА ВАНАДИЯ, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Куликов И.В.[1], Черных И.А.[1], Крылова Т.С.[1], Есаулков М.Н.[2], Солянкин П.М.[3], Шкуринов А.П.[3], Занавескин М.Л.[1]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3] Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail: kulikovivan1990@gmail.com

Диоксид ванадия характеризуется переходом полупроводник – металл при изменении температуры. До температуры перехода VO_2 представляет собой полупроводник с моноклинной симметрией решетки, выше температуры перехода – металл с тетрагональной симметрией решетки, что сопровождается существенным изменением коэффициента пропускания в ИК диапазоне. Изменение сопротивления от температуры характеризуется поведением кривой гистерезиса и шириной перехода R(T). Формирование эпитаксиальных пленок VO_2 позволяет получать контролируемые и воспроизводимые характеристики перехода, что является критически важным фактором для применения диоксида ванадия в устройствах. Известно, что степень окисления ванадия существенно сказывается на характеристиках перехода, что делает необходимым тщательный контроль стехиометрического состава соединения. Метод импульсного лазерного осаждения позволяет точно контролировать стехиометрический состав формируемых пленок за счет выбора состава мишени и давления газа в процессе роста. В работе выполнено формирование пленок диоксида ванадия методом импульсного лазерного осаждения, проведена оптимизация параметров роста, исследованы структурные и электрофизические характеристики пленок. Показано наличие перехода вблизи температуры 65°, что подтверждает наличие фазы диоксида ванадия. Ширина гистерезиса составила 3°, острота перехода – 2°, сопротивление в диапазоне температур 60-70°C изменилось на 3 порядка. Пропускание электромагнитного излучения в терагерцовом диапазоне частот (от 0.5 до 3 ТГц) уменьшилось на 80% при переходе в металлическую фазу. Изменение пропускания происходит однородно по спектру в исследованном диапазоне, анизотропии свойств поглощения в плоскости плёнки VO_2 при фазовом переходе не наблюдалось. Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №16-29-11800 офи_м).

РОСТ КРИСТАЛЛОВ СУЛЬФАТА НИКЕЛЯ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПОЛИМОРФНОГО ПЕРЕХОДА

Кульков А.М.
Санкт-Петербургский Государственный Университет, РЦ «Геомодель»
e-mail: aguacrystals@narod.ru

В интервале температур от 0 до 100 ºС сульфат никеля образует ряд водорастворимых кристаллогидратов, отличающихся количеством молекул воды в формуле, структурой и областью устойчивости. Согласно фазовой диаграмме сульфат никеля – вода, при 53,8ºС наблюдается □->□$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ полиморфный переход. В работе [1] отмечалось, что благодаря близкому расположению линий метастабильного равновесия □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ и стабильного равновесия □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ на большом расстоянии от эвтонической точки возможно образование текстурированных параморфоз □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ по □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$.

Проведенные эксперименты показывают, что выше температуры полиморфного перехода (53,8ºС) наблюдается устойчивый рост кристаллов □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ на затравку той же фазы. В диапазоне температур 56-54 ºС и небольших пересыщениях наблюдается рост затравки метастабильного □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$. При повышении пересыщения в растворе возможен рост двух фаз – массовая кристаллизация стабильной фазы и рост на затравку метастабильной. Основными элементами структур обеих полиморфных фаз являются тетраэдрические комплексы SO_4^{2-} и квазиоктаэдрические комплексы $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$. Несмотря на схожие элементы, структурные данные не дают основания для предположения эпитаксиальных соответствий между фазами. В первую очередь это связано с различной геометрией комплексов $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$. Эти комплексы более симметричны в структуре □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$, чем в □$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ [2]. От внутренней симметрии указанных комплексов также зависит окраска фаз. При ослаблении кристаллического поля и понижении симметрии окраска меняется от голубовато-зеленой до желто-зеленой. Комплексы $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$ весьма устойчивы и наблюдаются как в растворе, так и в кристалле. Поэтому, при повышении температуры окраска меняется от голубовато- зеленой до желто-зеленой в районе 53-55 оС. Таким образом, можно предположить, что вблизи затравочного кристалла в растворе происходит перестройка геометрии комплексов $[Ni(H_2O)_6]^{2+}$ вследствие повышения их симметрии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-29-11727 офи_м

[1] Кульков А.М, Гликин А.Э, // ЗВМО, 2007. Вып. 2. с. 104-111.

[2]Angel R.J., Finger L.W. Polymorphism of nickel sulfate hexahydrate // Acta Cryst. 1988. C44. P. 1869–1873..

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ УПРОЧНЯЮЩЕГО ОТЖИГА НЕМАГНИТНОГО СПЛАВА 40ХНЮ

Литвин В.С. [1,3], Садыков Р.А.[1,2], Трунов Д.Н. [1,4], Аксенов С.Н. [1,4], Шушунов М.Н.[4], Борисова П.А.[4], Глазков В.П.[4], Appavou M.S.[5], Ioffe A.[5]
[1]*Институт Ядерных Исследований РАН*
[2]*Институт Физики Высоких Давлений РАН*
[3] *Московский Физико-технический институт (Государственный университет)*
[4]*НИЦ Курчатовский Институт*
[5] *Jülich Centre for Neutron Science*
e-mail: vlitvin@inr.ru

Сплав 40ХНЮ является немагнитным вплоть до температур 100мК и не уступает по твердости закаленной стали. В закаленном состоянии сплав мягкий, для достижения твердости необходим отжиг при 450-700 ˚С. Максимальная твердость достигается после 2 и более часов отжига при 550 ˚С [1]. Упрочнение вызвано образованием наночастиц [2,3]. Кинетика упрочняющего отжига исследована методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), нейтронной дифракции и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). При температуре 450 ˚С наблюдается рост интенсивностей дифракционных пиков фазы Ni_3Al, а также рост интенсивности МУРН в области 0,01-0,05 $Å^{-1}$, что связано с образованием наночастиц с характерным размером 30-60 нм. Эти изменения происходят в течении длительного времени, более 10 часов, что видно из зависимости инварианта Порода, пропорционального общему объему наночастиц, от времени отжига (рис. 1). На кривых ДСК при нагреве до 1000˚С обнаружена особенность только при 950 ˚С , которая может быть связана с распадом фазы Ni_3Al.

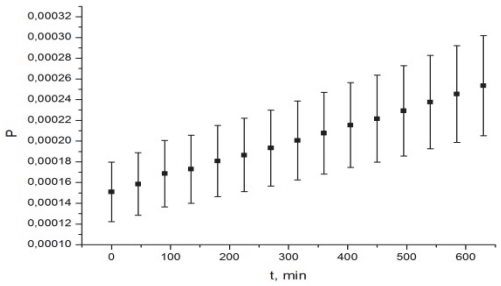


Рис. 1. Зависимость инварианта Порода от времени отжига при 450 ˚С.

[1] Б. В. Мотовилов (ред.) // Прецизионные сплавы. Справочник. М.: Наука, 1974, 521 с.

[2] В.А. Петров, Л. И. Вершинина, В.Ф. Суховаров, Р.Д. Стократов. // ФММ, 1984 том. 57, №1, с. 127-130

[3] Р.А. Садыков, В.С. Литвин, А.В. Гулютин, В.П. Глазков, А.А. Алексеев, M-S. Appavou, A. Ioffe. // Сборник трудов IV международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», с. 849-850.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ $Cd_3Ge_2As_4$ В ТРОЙНОЙ СИСТЕМЕ Cd-Ge-As

Лобанов Н.Н.[1], Аронов А.Н.[2], Федорченко И.В.[2,3], Маренкин С.Ф.[2,3]

[1] *ФГАОУВО «Российский университет дружбы народов»*

[2] *ФГБУН «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН»*

[3] *НИТУ «МИСиС»*

e-mail: nlobanov@sci.pfu.edu.ru

В системе Cd-Ge-As образуются несколько тройных соединений. Среди них наибольший интерес представляют $CdGeAs_2$ – полупроводник, обладающий уникальными свойствами, представляющими интерес для нелинейной оптики. Однако получению высококачественных монокристаллов этого соединения мешает недавно идентифицированное соединение $Cd_3Ge_2As_4$[1]. В данном исследовании это соединение было обнаружено при кристаллизации расплавов, как состава $CdGeAs_2$, так и состава $Cd_3Ge_2As_4$. В первых составах количество его достигало ~20%, во-вторых до 95% по данным РФА и микроструктурного анализа. Параметры кристаллической решётки $Cd_3Ge_2As_4$ составили a = b = 7.766(7) Å, c = 27.34(2) Å, α = β = 90°, γ = 120°. Индицирование проводилось в тригональной сингонии (гексагональная установка), пространственной группы P-3. Согласно данным ДТА соединение $Cd_3Ge_2As_4$ можно рассматривать как метастабильную фазу, которое переходит в стабильную фазу $CdGeAs_2$ при 435±5 °C. Об этом также свидетельствовали результаты отжига согласно СЭМ и ЭРС, отожженные образцы при температуре свыше 435 °C практически содержали только фазу $CdGeAs_2$.

[1] B.J. Riley, B.R. Johnson, J.V. Crum, M.R. Thompson // J. Am. Ceram. Soc., 2012, 95, № 7 p. 2161-2168.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФЕРРОМАГНИТНЫЕ ПЛЁНКИ $Zn_{1-x}Co_xO_y$

Лотин А.А.[1], Журавлёва А.С.[2], Новодворский О.А.[1], Михалевский В.А.[1], Паршина Л.С.[1], Храмова О.Д.[1], Черебыло Е.А.[1], Перов Н.С.[3], Макарова Л.А.[3], Шнейдер А.Г.[2], Кузьмин М.П.[2]

[1] *ИПЛИТ РАН - Филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] *Иркутский национальный исследовательский технический университет*

[3] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

e-mail: lotin_82@mail.ru

Возможность управлять спином носителей заряда обеспечило бурное развитие спинтроники и разработку новых материалов с полупроводниковыми и магнитными свойствами, что приведет к развитию информационных технологий нового поколения. Теоретические оценки показали, что температура Кюри в широкозонных магнитных полупроводниках должна быть выше, чем в узкозонных материалах [1]. Одним из перспективных материалов, которые могут быть применены в спинтронных устройствах, является прямозонный полупроводник оксид цинка, легированный 3d-металлами [2]. Наиболее интересным является кобальт, поскольку из всех 3d-металлов он имеет самый высокий предел растворимости в пленках $Zn_{1-x}Co_xO$ [3]. Тем не менее, до сих пор нет чёткого представления о природе возникновения высокотемпературного ферромагнетизма в тонких плёнках $Zn_{1-x}Co_xO$ и ее зависимости от концентрации кобальта и наличия вакансий кислорода. Поэтому целью настоящей работы является изучение структурных, оптических, магнитных и транспортных свойств тонких пленок $Zn_{1-x}Co_xO_y$ (x=0-0.45), синтезированных методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) в условиях дефицита кислорода.

Тонкие плёнки $Zn_{1-x}Co_xO_y$ были получены методом ИЛО при абляции мишеней 248 нм эксимерным лазером. Рентгеноструктурный анализ пленок $Zn_{1-x}Co_xO_y$ (x=0-0.3) показал, что в диапазоне концентраций кобальта 3-6 ат.% появляется пик вблизи угла 43°, которому может соответствовать отражение от плоскости (002) кубической фазы металлического кобальта (рис.1). Большая ширина этого пика (более 3°) говорит о малых размерах нанокластеров Co (или CoZn), которые при оценке по формуле Дэбая-Шеррера в пренебрежении их разориентации и наличия дефектов составляет несколько нанометров. Дальнейшее увеличение содержания кобальта в пленках $Zn_{1-x}Co_xO_y$ (x≥0.1) приводит к образованию парамагнитного Co_3O_4 кубической структуры, о чем свидетельствует пик отражения от плоскости (004) Co_3O_4 вблизи 44.5°.

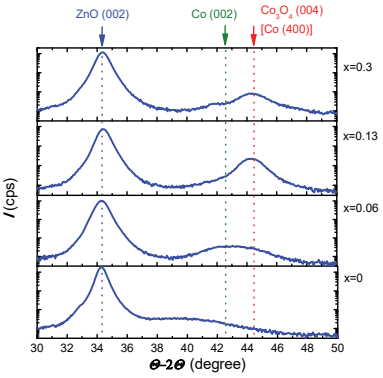


Рис.1. Рентгенограммы тонких пленок $Zn_{1-x}Co_xO_y$ в зависимости от содержания кобальта x.

Магнитные свойства тонких плёнок $Zn_{1-x}Co_xO_y$ при увеличении концентрации легирующей примеси изменяются немонотонно. Показано, что образцы с содержанием кобальта x=0; 0.03 и 0.10 являются парамагнитными. Наибольший ферромагнитный сигнал имеет тонкая плёнка $Zn_{0.87}Co_{0.13}O_y$, значение намагниченности насыщения для которой M_s составляет 55 emu/см^3, а коэрцитивной силы H_c – 26 Э. Остальные исследуемые образцы обладают слабым ферромагнетизмом при комнатной температуре.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 15-07-03331, 15-29-01171, 15-38-20369, 15-07-03580, 16-29-05385, 16-07-00842, 16-29-11719.

[1] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, Science 287, 1019 (2000).

[2] K. Sato and H. Katayama-Yoshida. Jpn. J. Appl. Phys. 39, L555 (2000).

[3] K. Ueda, H. Tabata, and T. Kawai. Appl. Phys. Lett. 79, 988 (2001).

РОСТ ИЗ РАСТВОРОВ И СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК ПАРА-ТЕРФЕНИЛА И ЕГО НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ С КОНЦЕВЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Лясникова М.С.[1], Сокольников Р.И.[1], Постников В.А.[1], Сорокина Н.И.[1], Алексеева О.А.[1], Гребенев В.В.[1], Шаухин М.К.[2], Борщев О.В.[2]

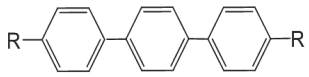
[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

mlyasnikova@yandex.ru

Пара-терфенил (3P) относится к семейству высокостабильных полупроводниковых олигофенилов, хорошо люминесцирующими в синем и близком УФ диапазонах. В настоящее время 3P применяется в производстве жидкофазных сцинтилляторов. При этом на сегодняшний день практически не разработана методика получения сравнительно крупных монокристаллических образцов, представляющих большой научный и практический интерес для разработки устройств органической опто-электроники и сенсорной техники.

В данной работе впервые представлены результаты исследования роста из растворов сравнительно крупных монокристаллических пластин пара-терфенила и его новых производных с концевыми заместителями «-$Si(CH_3)_3$»(TMS-3P-TMS) и «-$C(CH_3)_3$» (isobut-3P-isobut).



Методами ДСК и ТГА проведены термоаналитичесие исследования, в результате которых для новых производных 3P впервые установлены параметры плавления и обнаружены полиморфные переходы.

Методом роста на межфазной границе жидкость – воздух в условиях диффузии осадителя через паровую фазу выращены крупные монокристаллические пластины 3P длиной более 10 мм и толщиной 100-300 мкм (рис.1а) и впервые получены монокристаллические плёнки isobut-3P-isobut (рис.1б) и TMS-3P-TMS (рис.1.с), достигающие 10 мм в длину и толщиной до 50 мкм

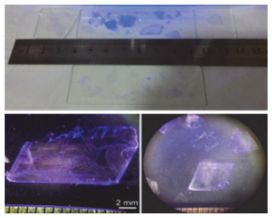


Рис.1. Оптические микроизображения монокристаллов: 3P (под УФ освещением),

Морфология, качество поверхности и толщина кристаллических плёнок изучены методами оптической, лазерной конфокальной и атомно-силовой микроскопией. Исследованы спектры поглощения и фотолюминесценции растворов и кристаллических плёнок. Методом монокристального рентгеноструктурного анализа при 293K и 85K для TMS-3P-TMS впервые расшифрована, а для 3P уточнена кристаллическая структура. Согласно наблюдениям, рост плёнок на межфазной границе жидкость – воздух осуществляется послойно по механизму 2D-зародышеобразования либо дислокационным способом.

СВОЙСТВА И МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ AlGaN В УСЛОВИЯХ ДЕСОРБЦИИ ГАЛЛИЯ

Майборода И.О., Занавескин М.Л., Езубченко И.С., Грищенко Ю.В., Пресняков М.Ю.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: mrlbr@mail.ru

Благодаря своим уникальным физическим свойствам нитриды галлия, алюминия и индия (GaN, AlN, InN) оказались широко востребованы в микроэлектронике. Благодаря высоким пробивным напряжениям, большой ширине запрещенной зоны и эффектам спонтанной и пьезоэлектрической поляризации нитриды используются для создания транзисторов с высокой подвижностью электронов (GaN HEMT). По совокупности частотных и мощностных характеристик СВЧ и КВЧ устройства на основе GaN HEMT превосходят прочие твердотельные аналоги. В то же время рост гетероструктур нитридов вынужденно производится на подложках, рассогласованных по параметру решетки, что приводит к формированию пленок с высокой плотностью дефектов и развитой морфологией. Ситуация осложняется недостаточным пониманием механизмов роста нитридных пленок.

В докладе будут представлены результаты исследований механизмов роста высокотемпературных слоев AlN и AlGaN методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках сапфира. Путем сравнения пленок AlN и AlGaN, выращенных в одинаковых условиях, показано, что галлий может выступать в роли сурфактанта [1] и способствовать улучшению морфологии нитридных пленок. Разработана модель, описывающая зависимость скорости роста AlGaN от температуры. Предложен механизм, объясняющий эффект сурфактанта в условиях слабого покрытия поверхности веществом сурфактантом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00177 мол_а. Экспериментальная часть работы была частично выполнена на оборудовании Ресурсного Центра Зондовой и Электронной Микроскопии и Ресурсного Центра Лабораторных Рентгеновских Методов (Курчатовский Комплекс НБИКС- технологий, НИЦ “Курчатовский институт”)

[1] T. M. Altahtamouni et al. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2012, **45**, 285103

МАГНИТО-СТРУКТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ГИДРИДАХ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ФАЗ ЛАВЕСА RMn_2H_x

Макарова О.Л.[1], Гончаренко И.Н. [2], Иродова А.В. [1], Цвященко А.В.[3], Фомичева Л.Н.[3]
[1]НИЦ «Курчатовский институт»
[2]Лаборатория Леона Бриллюэна
[3]Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина, РАН
e-mail:Makarova_OL@nrcki.ru

В зависимости от сорта редкоземельного атома, соединения RMn_2 кристаллизуются в кубическом (C15) или гексагональном (C14) структурных типах. Как кубические, так и гексагональные гидриды RMn_2H_x обнаруживают необычную взаимосвязь между магнитным и водородным упорядочением. В кубических гидридах $RMn_2H_{4.2}$ (R=Y, Gd, Tb, Dy, Ho) наблюдаются магнито-структурные переходы, при которых водородная и магнитная подрешетки упорядочиваются одновременно [1,2]. В гексагональных гидридах RMn_2H_x (R=Er, Tm, Lu) состояния с ближним и дальним магнитным порядком чередуются по мере увеличения содержания водорода [3,4]. Синтез при высоких давлениях и высоких температурах позволяет получить гексагональную модификацию соединений, обладающих кубической симметрией в обычных условиях [5]. Сравнение свойств гексагональной и кубической форм одного и того же соединения дает уникальную возможность исследовать роль топологии кристаллической структуры в формировании магнитной и водородной подсистем. В настоящей работе методом дифракции нейтронов и рентгеновского излучения исследованы процессы водородного и магнитного упорядочения в гидридах метастабильных фаз Лавеса RMn_2H_x (R=Y, Tb, Dy) в диапазоне температур от 1.5 до 300 K. Определены закономерности размещения атомов водорода в междоузлиях, степень деформации кристаллической решетки, температуры магнитных превращений, величины и направления магнитных моментов в водородных фазах и в нестехиометрических гидридах.

[1] I.N. Goncharenko, I. Mirebeau, A.V. Irodova, E. Suard // Phys. Rev. B, 1999, v. 59, p. 9324 – 9331

[2] I.N. Goncharenko, I. Mirebeau, A.V. Irodova, E. Suard // Phys. Rev. B, 1999, v. 59, p. 9324 – 9331

[3] O.L. Makarova, I.N. Goncharenko, A.V. Irodova, I. Mirebeau, E. Suard // Phys. Rev. B, 2002, v.66, p.104423 - 104431

[4] O.L. Makarova, I.N. Goncharenko, F. Bouree // Phys. Rev. B, 2003, v. 67, p. 134418 - 134422.

[5] K. Inoue, Y. Nakamura, A.V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva // JMMM, 1995, v. 140-144, p.797 - 798

ФИЛОГЕНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ СУБСОЛИДУСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ Mg-Be-Al-СИЛИКАТОВ

Мамонтова С.Г., Михайлов М.А., Богданова Л.А., Белозёрова О.Ю.
ИГХ СО РАН
svelta@igc.irk.ru

Субсолидусная кристаллизация бериллиевого индиалита (**БИ**, идеальный состав $Mg_2BeAl_2Si_6O_{18}$) изучена при вариациях исходными соотношениями видообразующих компонентов от 100 до 0% минала БИ с позиций фазовых портретов [1] и генетического наследования [2]. Состав шихты определил только интервалы кристаллизации фаз, пути формирования структуры БИ оказались идентичны в пределах метода пробоподготовки – спекания смесей оксидов или ксерогелей.

БИ из ксерогелей кристаллизуется параллельно с формированием и расходованием лишь двух основных промежуточных фаз: со структурой β-кварца (ФСКВ) и петалита (ФСП), содержащих все четыре видообразующих компонента в близких к стехиометрии соотношениях. Тонкая подстройка структуры происходит на всех уровнях фазовых портретов: локального (полиморфный переход ФСКВ–ФСП – искажение решётки, реконструктивный ФСП–БИ – изменение типа сочленения структурных полиэдров, смена КЧ Mg с 4 до 6), фазового (парагенезисы), текстурного (форма выделения фаз). Стабильный БИ формируется постепенно из «начинённых силикатных структур» [3] перераспределением элементов. D/n и интенсивности рентгенографических линий основных участников синтеза близки к рефлексам их структурных прототипов: БИ – 8,383(100), 2,986(90), 3,344(60), и БИ (неравновесный) – 8,38-8,408, 2,985-2,993, 3,35-3,351, соответственно; ФСКВ 3,413-3,425(100), 4,43-4,47(20), 1,849-1,851(30); ФСП 3,692-3,71(100), 3,619-3,631(80), 3,502-3,525(20). Это указывает на необходимость учёта реального состава компонентов парагенезисов, в т.ч. природных систем.

[1] Михайлов М.А. // Мат-лы Всерос. совещ. «Современные проблемы геохимии», Иркутск, 2012, С. 288 – 291,

[2] Евзикова Н.З. // Сб. Новые идеи в генетической минералогии. Л.: Наука, 1983, С. 12 – 21, [3] Дэна Дж. и др. Система минералогии. Т. III. Минералы кремнезема. М.: Мир, 1966, 430 с.

РОСТ КРИСТАЛЛОВ α-NSH И KCNSH МЕТОДОМ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПЕРЕПАДА

Маноменова В.Л.[1], Масалов В.М.[2], Руднева Е.Б.[1], Волошин А.Э.[1], Жохов А.А.[2], Емельченко Г.А.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Институт физики твердого тела РАН*
e-mail: manomenova.vera@mail.ru

Методом температурного перепада в формообразователях и на платформе в статическом и динамическом режимах выращены кристаллы α-$NiSO_4 \cdot 6H_2O$ (α-NSH) и смешанные кристаллы $K_2Co_xNi_{1-x}(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCNSH) из растворов различного состава. Для поддержания постоянства раствора в процессе кристаллизации применялась подпитка путем растворения мелкокристаллической массы, полученной спонтанным осаждением из растворов соответствующего состава. Были исследованы структурное совершенство и спектры оптического пропускания полученных кристаллов.

Исследование методом рентгеновской топографии структурного совершенства выращенных в формообразователях кристаллов α-NSH и KCNSH показало, что в них отсутствуют зонарные и секториальные границы. Во всех кристаллах α-NSH отмечалась высокая (более 10^5 $см^{-2}$) плотность дислокаций.

Анализ топограмм смешанных кристаллов KCNSH разного состава, выращенных в формообразователях, показал, что кристаллы также содержат большое количество дислокаций (~ 10^4 $см^{-2}$), образовавшихся на границе затравки и кристалла, тогда как затравочные пластины свободны от них. Источниками дислокаций явились включения, возникающие при регенерации затравки. Генерации дислокаций в объеме кристаллов не обнаружено.

Исследования спектральных характеристик оптических элементов толщиной 10 мм, изготовленных из кристаллов α-NSH и KCNSH, выращенных методом температурного перепада, показали, что высокая плотность дислокаций не приводит к существенному светорассеянию. Пропускание α-NSH и KCNSH в УФ диапазоне 240-280 нм составляет более 80%, что позволяет использовать полученные кристаллы в качестве зонных фильтров в приборах регистрации источников УФ излучения.

Работа поддержана Российским научным фондом (Проект № 15-12-00030).

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВХОЖДЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ АЛЮМИНИЯ В СТРУКТУРЫ $CaSiO_3$ И $MgSiO_3$ – ПЕРОВСКИТОВ ПРИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ МАНТИИ ЗЕМЛИ.

Марченко Е.И., Еремин Н.Н., Бычков А.Ю.
МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail: marchenko-ekaterina@bk.ru

Несмотря на повышенную активность в сфере изучения состава мантии Земли, на сегодняшний день остается много вопросов относительно фазовой стабильности, как в минералогии, так и в геохимии глубинных оболочек. В частности, до настоящего времени геохимическая роль Ca в мантии до конца не определена, и существуют противоречивые данные о стабильности высокобарных фаз $CaSiO_3$ при термодинамических условиях, соответствующих мантии Земли.

Целью настоящего исследования являлось компьютерное моделирование вхождения атомов Al в структуры Mg- и Ca- перовскитов атомистическими методами и исследование фазовой диаграммы для $CaSiO_3$. Расчеты осуществлялись полуэмпирическими методами в программе GULP 4.0 в диапазоне давлений 0-180 ГПа с использованием двух наборов потенциалов межатомного взаимодействия [1,2] для различных модификаций $CaSiO_3$. Проведенные расчеты позволили воспроизвести фазовую диаграмму $CaSiO_3$, уточнить уравнения состояния для $CaSiO_3$ и $MgSiO_3$, рассмотреть изоморфные емкости исследуемых фаз по Al при термодинамических условиях мантии Земли.

[1] Урусов В.С., Еремин Н.Н. // М.: ГЕОС, Москва, 2012, ISBN: 978-5-89118-581-0.

[2] Pedone A., G. Malavasi et al.// J. Phys. Chem. B., 2006, v. 110, p. 11780-11795.

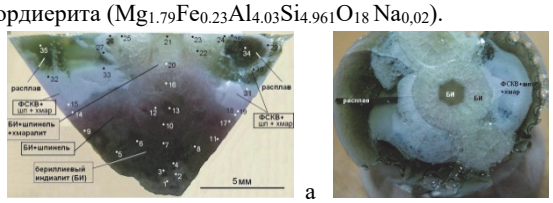
СОСУЩЕСТВОВАНИЕ СТАБИЛЬНОЙ И МЕТАСТАБИЛЬНЫХ (КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И РЕНТГЕНОАМОРФНОЙ) МОДИФИКАЦИЙ СИЛИКАТОВ

Михайлов М.А, Мамонтова С.Г., Белозерова О.Ю., Богданова Л.А.
ИГХ СО РАН;
e-mail: mikmik@igc.irk.ru

Проблема, вынесенная в заголовок этой работы, сейчас находится на стадии накопления данных для конкретных силикатов (и не только их) даже в относительно простых системах «расплав – кристалл».

Предложен экспериментальный метод описания эволюции структуры силикатных расплавов, которым однозначно устанавливаются полные непрерывные ряды преобразований «силикатный расплав - метастабильные кристаллические фазы - стабильный кристаллический силикат» [1]. В основе этого комплексного метода лежит создание вертикального прямого градиента температуры (Тверх >Тниз) в расплавленном (предварительно синтезированном) стабильном силикате, организация стока тепла через сильно теплопроводный материал тигля-кулька, проведение кристаллизации методами Штебера либо Стокбаргера с получением *зонального* слитка, детальное изучение участков слитка структурно и химически. Здесь выявляются частично родственные [2] - структурно и химически – соединения, получают «фазовые портреты» [3] всех стадий формирования слитка. В частности, однозначно устанавливается полная картина кристаллохимического соответствия стабильного и метастабильных кристаллических фаз на локальном и фазовом уровнях.

Пример. Опишем результаты кристаллизации расплава предварительно синтезированного твердого раствора на основе бериллиевого индиалита (БИтв.р-р, со структурой берилла [4]) из исходного состава [70% минала идеального бериллиевого индиалита (БИ, $Mg_2BeAl_2Si_6O_{18}$) + 30% минала идеального кордиерита (К, $Mg_2Al_4Si_5O_{18}$] + 0,5мас.% Cr_2O_3]~ $Mg_{1.99}Cr_{0.04}Be_{0.70}Al_{2..59}Si_{5.68}O_{18}$; *Си-изл, d/n: 8.42, 3.00, 4.07, 3.35, 3.31*]. Слиток, полученный методом Штебера, специально усложнен нами организацией «температурной волны». Исследована структура и химический состав фаз, составляющих слои (участки) зонального слитка (рис. а, б), выращенного на затравке Fe-кордиерита ($Mg_{1.79}Fe_{0.23}Al_{4.03}Si_{4.961}O_{18}$ $Na_{0,02}$).



а

б

Рис. Фото слитка «БИК30распл3»: а – разреза перпендикулярно поверхности слитка; б – поверхности слитка. Арабские цифры – точки микрорентгеноспектрального количественного анализа участков слитка.

Цвета зон слитка подчеркивают смену парагенезисов *(снизу вверх)*: *серый* слой [рис. а, (•)1-2, перекристаллизованная затравка, дно тигля]: БИтв.р-р, $Mg_{1.76}{}^{VI}$ $Fe_{0.02}Cr_{0.04}Be_{0.65}Al_{3.18}Si_{5.37}O_{18}$ $Na_{0.002}K_{0.002}$ (далее несущественные примеси - Fe,Na,K - опускаем), d/n: 8.39, 2.99, 3.35, 3.11, 4.07; *зеленый* слой [рис.а, (•)3-8], БИ тв.р-р, $Mg_{1.80}Cr_{0.04}Be_{0.65}$ $Al_{3.08}Si_{5.43}O_{18}$; *розовый* слой [рис.а, (•) 9-13]: БИ тв.р-р, $Mg_{1.94}Cr_{0.01}Be_{0.72}Al_{2.63}Si_{5.68}O_{18}$ + малиново-розовая Cr-шпинель $(Mg_{0.95}Be_{0.045}Si_{0.005})^{IV}(Al_{1.31}Cr_{0.67}Mg_{0.02})^{VI}O_4$, *d/n: 2.43*, *2.00, 1.43, 4.65*;*водяно-белый* слой [рис.а, (•)14,16,17], БИтв.р-р $Mg_{1.94}Cr_{0.01}Be_{0.72}Al_{2.69}Si_{5.64}O_{18}$ + примесь Cr-шпинели того же состава, обросшая белым хмаралитом $Mg_{1.21}Cr_{0.01}Be_{0.46}$ $Al_{1.78}Si_{3.38}O_{20}$; *d/n: 2.01, 1.89, 2.33, 2.82;* кремоватый пористый БИ тв.р-р, [рис.а, (•)20,22-24], d/n: 8.40, 2.99 и т.д. ; молочно-белый слой [рис.а, (•)26-33, фаза со структурой β-кварца, ФСКВ, $(Si_{0.64}Al_{0.28}Mg_{0.21}Be_{0.09})^{IV}O_2$, *d/n: 3.425, 1.85,4.45;* + *примесь* Cr-шпинели того же состава., обросшей белым хмаралитом;. участки *зеленого* расплава [рис.а, (•)34, 35] состава $Mg_{1.83}Cr_{0.01}Be_{1.04}Al_{2..64}Si_{5.57}O_{18}$ ~ $(Mg_{0.203}Be_{0.12}Al_{0.29}Si_{0.62})^{IV}O$ 2. На поверхности слитка (рис.б) ясно видны: желтовато-серый шестигранник *стабильного* БИ (следствие «методики температурной волны»), сформировавшийся из пористого *водяно-белого* БИтв.р-р (к.ч.Mg=6), и белое разорванное кольцо ассоциации метастабильных фаз [ФСКВ + примесей (Cr-шпинели + хмаралита)], образовавшихся при охлаждении потока поверхностного расплава высокотемпературопроводной стенкой Pt/Rh тигля-кулька.

Эволюционный ряд (100mol% БИ (96mol% ФСКВ + 3%шпин. + 3% хмар.) демонстрирует: а) уменьшение координационного числа (КЧ) магния от VI (в БИ) до IV (в *метастабильных* фазах: *примесной* Cr-шпинели и далее в *доминирующей* ФСКВ; б) уменьшение сумм молярных топологических информационных сложностей структур ($I_{G,mol}$ [5]) последующих совокупностей фаз: от ~362 • 10^{23} bit/mol (в БИ) до 20• 10^{23} bit/mol.

В докладе планируется более подробно представить эти фазы: БИ, примеси и доминирующие метастабильные вещества.

[1] Михайлов М.А. и др.// Зап. Рос. минер. об-ва, 2007, спец. вып., с.199-213;

[2] Евзикова Н.З. // Сб. «Новые идеи генетической минералогии», Л.: Наука, 1983, с.12-21;

[3] Михайлов М.А.// Тез. докл. Мат-лы Всерос. совещ. «Современные проблемы геохимии», Иркутск, 2012, с. 288-291.

[4] Михайлов М.А., Рождественская И.В. и др.// Кристаллография, 2009, т. 54, № 2, с. 231-238; [5] Михайлов, Кривовичев С. // Canadian Mineral. (в печати)

МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК InSb:Mn

Михалевский В.А.[1], Новодворский О.А. [1], Паршина Л.С. [1], Храмова О.Д. [1], Лотин А.А. [1], Черебыло Е.А. [1], Панченко В.Я. [1], Маренкин С.Ф. [2], Аронов А.Н. [2], Аронзон Б.А..[3], Баранов В.В.[3], Трухан В.М. [5]

[1]*Институт Проблем лазерных и информационных технологий РАН, филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*

[3]*НИЦ «Курчатовский институт»*

[4]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (БГУИР)*

[5]*Государственное НПО «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»*

e-mail: uhr@inbox.ru

Исследование ферромагнитных полупроводников (AIII-BV):Mn представляет большой интерес в связи с возможностью использования в магнитноэлектронных и спинтронных устройствах [1]. InMnSb представляет собой узкозонный полупроводник p-типа, близкий по параметрам решетки с InSb, характеризующийся высокой подвижностью носителей. Температура Кюри в сплавах In1−xMnxSb достигает 600 К [1]. Хотя растворимость марганца в InSb невелика, метод ИЛО позволяет получать из мишеней сплавов InSb-MnSb однородные тонкие пленки InSb:Mn с концентрацией марганца до 20%. Магнеторезистивный эффект в тонких пленках InSb:Mn с большой концентрацией марганца в литературе методом ВАХ пока не исследовался.

В настоящей работе мы методом ВАХ исследовали магнеторезистивный эффект в тонких пленках InSb:Mn с содержанием MnSb до 20%, полученных методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) в бескапельном режиме на подложках с-сапфира из мишеней сплава композита InSb+MnSb. Установлено, что концентрация, подвижность носителей заряда и удельное сопротивление пленок зависят от температуры подложки при осаждении и от плотности энергии на мишени. Однородность состава и морфологию пленок исследовали с помощью СЭМ с приставкой для энерго-дисперсионной рентгеновской спектроскопии, методом рентгенофазового анализа и методом АСМ с использованием магнитного кантилевера. Величина магнетосопротивления пленок p-(InSb:Mn) в постоянном магнитном поле 0,15 Тл и 1 Тл определялась методом ВАХ. По полученным ВАХ определялись магнетосопротивление MR(U) в температурном интервале от 10 К до 300 К по формуле (R(H) – R(0)) / R(0) * 100%. Наблюдалась зависимость магнетосопротивления образца при различной ориентации магнитного поля относительно направления тока при комнатной температуре. Нами впервые наблюдалось различное поведение продольного магнетосопротивления пленок в зависимости от взаимной ориентации коллинеарных магнитного и электрического полей, что может быть вызвано отличающимися длинами свободного пробега носителей для параллельного и антипараллельного направлений полей E и H в тонких пленках InSb:Mn. В пленках с содержанием MnSb 20% исследована температурная зависимость магнетосопротивления. При снижении температуры пленки от комнатной при 250 К наблюдался переход от отрицательного гигантского магнетосопротивления (ГМС) к положительному. По мере охлаждения образца величина ГМС росла и достигала 600% при 15 К в магнитном поле 0,15 Тл, направленном перпендикулярно плоскости пленки.

Работа поддержана проектами РФФИ № 15-07-03331, 15-29-01171, 15-38-20369, 15-07-03580, 16-29-05385, 16-07-00842, 14-47-03605 и грантом правительства Московской области для финансирования научного проекта №14-47-03605

[1] Kochura A.V., Aronzon B.A.. et al // J. Appl. Phys. 2013 , vol 113, p 083905-1–083905-7.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА АПАТИТОВ С ПРИМЕСЯМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Николаев А.М.[1], Колесников И.Е.[1], Kalkura S.N.[2], Франк - Каменецкая О.В.[1], Кузьмина М.А.

[1]*Санкт-Петербургский Государственный Университет*

[2] *Anna University,*

e-mail: floijan@gmail.com

Апатиты, содержащие редкоземельные элементы (REE), интенсивно используются в медицинских и биологических исследованиях [1]. Опубликованные данные не охватывают всего ряда лантаноидов и не характеризуют зависимость люминесцентных свойств апатитов от содержания REE в растворе и кристалле.

Для устранения этого пробела нами методом осаждения были синтезированы гидроксилапатиты, содержащие широкий спектр REE3+ (от La до Er) с соотношением REE/Ca в растворе = 0,05, а также ряды апатитов с различным содержанием Eu и Ce. (REE/Ca в растворе = 0 – 0,05) По результатам комплексного исследования (порошковая рентгенография, ИК-спектроскопия, рентгеноспектральный микроанализ) синтезированные апатиты можно охарактеризовать как наноразмерные (ОКР~ 30 нм) водосодержащие, характеризующиеся дефицитом кальция и OH-ионов. Соотношение РЗЭ/Ca в кристаллическом осадке < 2.

По данным люминесцентной спектроскопии на всех спектрах синтезированных апатитов зафиксированы характеристические линии, соответствующие излучению катионов REE3+ в апатитовой матрице. По результатам исследования Eu-апатитов наиболее интенсивным люминофором является апатит, синтезированный из раствора, характеризующегося отношением Eu/Ca=0.03 (рис.1).

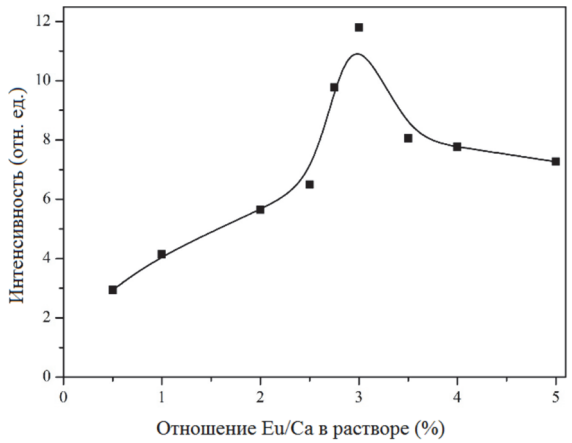


Рис. 1. Зависимость интегральной интенсивности полосы, соответствующей вынужденному электрическому дипольному переходу 5D0–7F2 от отношения Eu/Ca в растворе.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ (проект № 3.38.243.2015) с использованием оборудования ресурсных центров «ОЛМИВ», «Нанотехнологии», «Геомодель» и «Рентгендифракционные методы исследования вещества».

[1]. Perera T.S.H., Han Y., Lu X., Wang X., Dai H. and Li S. // Journal of Nanomaterials, 2015, ID 705390

СИНТЕЗ ТОНКИХ ПЛЕНОК VO2 МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ И СОЗДАНИЕ МЕМРИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ВАНАДИЯ

Новодворский О.А., Паршина Л.С., Лотин А.А., Храмова О.Д., Михалевский В.А., Черебыло Е.А., Панченко В.Я.
ИПЛИТ РАН, филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: onov@mail.ru

Новые перспективы в создании компьютерных систем открывает использование аналоговой архитектуры искусственных нейронных сетей, позволяющих оптимизировать принцип обработки команд по сравнению с цифровым принципом, повсеместно используемым в классическом компьютере. Основу предлагаемых нейроморфных систем составляют мемристоры - двухполюсные устройства, электрическое сопротивление которых изменяется пропорционально заряду, протекшему через него. Электрические характеристики мемристора определяются предысторией его функционирования, что похоже на свойства синапса биологических нейронных систем. С появлением возможности формирования наноразмерных структур впервые было экспериментально показано, что мемристивный эффект возникает в наноразмерных структурах металл-диэлектрик-металл за счет перемещения зарядов в сверхтонком диэлектрическом слое при приложении электрического поля, например, при движении вакансий кислорода в слое диоксида титана TiO_2 толщиной ~5 нм [1]. В настоящее время мемристивный эффект был обнаружен во многих бинарных оксидах и нитридах металлов и список таких материалов постоянно расширяется [2]. Однако, для большинства типов мемристоров, в том числе для мемристоров на основе оксидов переходных металлов, остается нерешенным вопрос достаточно высокой нестабильности и неповторяемости значений таких параметров, как напряжение переключения, сопротивление в низкоомном и в высокоомном состояниях [3]. Основной причиной нестабильности характеристик мемристора является неоднородность распределения электрического поля в активном слое мемристора из-за неидеальности геометрии мемристорной ячейки или неидеальности активного слоя. Соответственно, существует два пути повышения стабильности характеристик мемристора: совершенствование геометрии, а также поиск новых материалов и новых способов формирования активного слоя и электродов мемристора, что явилось целью нашей работы. Была поставлена задача получения и исследования тонких пленок VO_2и VO_{2-x}и создание мемристоров на их основе методом импульсного лазерного осаждения.

В данной работе методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) с сепарацией капель факела на монокристаллических подложках сапфира (0001) и кремния (111) получены тонкие пленки VO_2. Установлено влияние плотности энергии на мишени и давления кислорода на структурные и электрические свойства пленок. Все кристаллические пленки VO_2 демонстрируют переходы полупроводник–металл со значительным изменением электрического сопротивления от двух до пяти порядков величины, аморфные пленки демонстрируют характерную полупроводниковую зависимость сопротивления от температуры. Установлено, что температурный гистерезис оптического пропускания в области длин волн видимого и ближнего УФ диапазона не везде повторяет гистерезис электрического сопротивления, что связано с изменением поглощения в пленке VO_2[4]. Бескапельным методом ИЛО на подложках с- сапфира с применением масочных технологий получены многослойные структуры $Au/VO_2/VO_{2-x}/Au$. Активная область мемристора, состоящая из двух слоев (слой обедненного оксида ванадия VO_{2-x} и слой диоксида ванадия VO_2), располагалась между двумя металлическими электродами. Значение x варьировалось в процессе роста структур путем изменения давления кислорода в вакуумной камере, что обеспечивало необходимую проводимость в обедненном инжекционном слое VO_{2-x} [5]. Для исследования мемристивных свойств при комнатной температуре структура $Au/VO_2/VO_{2-x}/Au$, в которой толщина слоев VO_2/VO_{2-x}составляла 10/30 нм, помещалась на медную пластину с целью термической стабилизации. Установлено, что под действием последовательности коротких импульсов напряжения, прикладываемых к данной структуре, ее сопротивление уменьшается после каждого импульса, демонстрируя мемристивный эффект. Типичная вольтамперная характеристика такой структуры имеет вид петли гистерезиса, что характерно для мемристоров [6]. Таким образом, нами впервые продемонстрирована возможность использования диоксида ванадия в качестве рабочего материала для создания мемристоров на базе оксида ванадия в новой геометрии $Au/VO_2/VO_{2-x}/Au$.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 14-07-00688, 14-47-03605, 15-38-20369, 15-29-01171, 15-07-04142, 15-07-03331, 15-07-03580, 16-29-05385, 16-07-00842, 16-29-11800.

[1] Strukov D.B., Snider G.S.et al. // Nature,2008,453, 80-83.

[2] Yang J.J., Strukov D.B. and Stewart D.R. // Nature nanotechnology, 2013, 8,№1 13-24.

[3] Jo S.H., Chang T.et al. // Nano Letters,2010,10, 1297-1301.

[4] Novodvorskii O.A., Parshina L.S.et al. // Semiconductors,2015, 49, №5, p 563-569.

[5] Новодворский О.А., Паршина Л.С. и др.//Известия РАН, Серия Физическая, 2016, 80, №4, с 417-421.

[6] Chua L..// Applied Physics A, 2011, 102, 765-783.

ВЛИЯНИЕ ФОНОННОГО АНГАРМОНИЗМА НА ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА $FE_{1-X}CO_XSI$

Ноговицына Т.А., Повзнер А.А., Филанович А.Н.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

e-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Длиннопериодические геликоидальные ферромагнетики на основе сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$, обладают сложной магнитной и кристаллической структурой, для которых характерно нарушение как магнитной, так и атомной киральности, при изменении химического состава [1]. При этом природа формирования их термодинамических свойств все еще не установлена.

В настоящей работе развивается самосогласованная термодинамическая модель решеточных свойств соединений $Fe_{1-x}Co_xSi$ (x=0.1,0.3,0.5), в рамках которой учитывается решеточный ангармонизм, включающий вклад акустических и оптических колебаний кристаллической решетки твердого тела. Учтено, что характеристические температуры Дебая (θ_D) и Эйнштейна (θ_E), которые определяют температурные зависимости теплоемкости и теплового расширения, зависят от объема, который рассчитывается на основе термодинамического потенциала, а θ_D является функцией модуля упругости. Построена самосогласованная процедура расчета тепловых и упругих свойств сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$. Рассчитаны решеточные составляющие теплоемкости, коэффициентов теплового расширения (КТР) и модулей упругости $Fe_{1-x}Co_xSi$. Выделены магнитные и электронные составляющие теплоемкости и КТР. Продемонстрирована взаимосвязь решеточного ангармонизма с изменением атомной киральности.

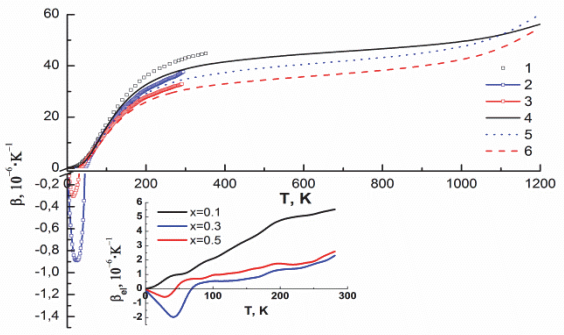


Рис.1. Температурная зависимость объемного КТР $Fe_{1-x}Co_xSi$ 1,2,3 – экспериментальные данные, 4,5,6 – результаты расчета решеточной составляющей в настоящей работе для x=0.1,0.3,0.5, соответственно. На вставке: температурная зависимость электронного вклада в КТР.

[1] Grigoriev S.V., Chernyshov D. et al. // Phys. Rev. Lett., 2009, 102, 037204.

[2] П.В. Гельд, А.А. Повзнер и др. // ДАН СССР, 1987, том 297, с 1359-1363.

УСЛОВИЯ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОКСИДА ТИТАНА(IV) ИЗ η-МОДИФИКАЦИИ В АНАТАЗ

Оболенская Л.Н., Савинкина Е.В., Кузьмичева Г.М.

Московский технологический университет

e-mail: savinkina@mirea.ru

Ранее было установлено, что предшественником анатаза в ходе синтеза его из $TiOSO_4$ может служить фаза «η-TiO_2» [1], состав которой описывается как $TiO_{2-x}\cdot mH_2O$, а структура, вероятнее всего, представляет собой сверхструктуру по отношению к структуре анатаза с молекулами воды в межслоевом пространстве структуры. На поверхности наночастиц выявлено присутствие OH, HSO_4 и H_2O [2]. В работе [2] установлены интервалы температуры и длительности гидролиза, отвечающие кристаллизации «η-TiO_2» и анатаза.

Целью данной работы было изучение влияния добавок различных веществ-сенсибилизаторов на переход «η-TiO_2» в анатаз.

Показано, что присутствие метиленового синего (MB), метилового красного (MR), хлорофиллов A и B, а также H_2O_2 (в высокой концентрации) подавляет как переход из «η-TiO_2» в нано-анатаз, так и рост кристаллитов η-фазы под действием разбавления реакционной смеси.

На дифрактограмме образца, осаждённого в присутствии раствора копропорфирина I в $CHCl_3$, характерное для «η-TiO_2» малоугловое отражение (2θ~4° для CuKα), плохо сформировано. Это же отражение становится более выраженным и сдвинутым в сторону больших углов на дифрактограммах образцов, осаждённых при бо̀льших концентрациях MB и MR. В случае модифицирования оксида титана(IV) пероксидом водорода (фотосенсибилизатор при взаимодействии с Ti(IV)) концентрация H_2O_2 оказывает решающее влияние на фазовый состав продукта (только 1M H_2O_2 подавляет переход «η-TiO_2» в анатаз).

Фотокаталитическая активность образцов (видимый свет) изучена в модельной реакции обесцвечивания метилового оранжевого; максимальная эффективность катализатора достигнута при одновременной коагуляции TiO_2 и образовании пероксокомплексов Ti(IV).

[1] Dadachov M. // US Pat. 0144793, 2006.

[2] Vasilyeva I., Kuz'micheva G., et al. // New J. Chem., 2016, vol 40, no 1, p 151-161.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ РОСТА НАНОКРИСТАЛЛОВ CDSE В НАТРИЕВО-ЦИНКОВО-СИЛИКАТНОМ СТЕКЛЕ

Онущенко П.А.[1,2], Онущенко А.А[3]
[1]Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт химии силикатов РАН
[3]Научно-исследовательский и технологический институт оптического материаловедения Всероссийского научного центра «ГОИ им. С.И. Вавилова»
e-mail: petr.onushchenko@gmail.com

Методом рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами, РМУ, изучена кинетика выделения наноразмерных кристаллов CdSe в натриево-цинково-силикатном стекле при двухстадийных термообработках при различных температурах первичных и вторичных термообработок.

В работе изучена кинетика выделения кристаллической фазы CdSe при двухстадийных режимах термообработок: трех температурах вторичных термообработок, равных 550, 575 и 600 ºС и различных температурах первичной термообработки 420, 450, 480 и 510 ºС. Учитывая, что сдвиговая вязкость стеклообразной матрицы изменяется примерно на порядок при изменении температуры на 25 ºС, выбранные температуры вторичных термообработок позволяют варьировать скорости процессов выделения примерно на два порядка и проследить за кинетикой на различных стадиях процесса выделения кристаллической фазы.

На угловых зависимостях интенсивности РМУ отчетливо видны побочные дифракционные максимумы, что свидетельствует об узком распределении по размерам кристаллов CdSe, не превышающем 5-7% на половине высоты.

После выделения кристаллической фазы возникает устойчивая структура. Размеры кристаллов и относительный объем фазы не изменяются, в переделах погрешности измерений ± 1-2%, при длительностях прогревания, по крайней мере, на порядок превышающих длительность стадии выделения.

Роль первичной термообработки не так отчетливо выражена, как в случае выделения PbS[1], но также понижение температуры первичной термообработки приводит к увеличению размеров кристаллов на стадии завершения выделения кристаллической фазы CdSe (Рис. 1). Предельный относительный объем кристаллической фазы при всех режимах не превышает 0.14%.

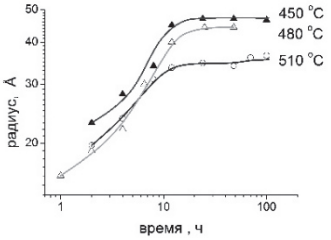


Рис.1. Зависимости в логарифмическом масштабе радиусов нанокристаллов CdSe от времени термообработки при 600 ºС при различных температурах первичной термообработки.

[1] Атонен О.В., Голубков В.В., Онущенко А.А. // Физика и химия стекла, 2010, том 36, № 4, с 481-493.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПСЕВДОБИНАРНЫХ СПЛАВОВ $(GeTe)_m$-$(Sb_2Te_3)_n$

Орлов В.Г.[1,2], Сергеев Г.С.[1]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Московский физико-технический институт
e-mail: Sergeev_GS@nrcki.ru

Для соединений GeTe, Sb_2Te_3, $GeSb_2Te_4$ и $Ge_2Sb_2Te_5$, принадлежащих классу псевдобинарных сплавов $(GeTe)_m$-$(Sb_2Te_3)_n$, которые переходят из кристаллического состояния в аморфное и совершают обратный переход под действием лазерного излучения или импульса электрического тока за необычайно короткие времена порядка 10-100 нсек (так называемые, “phase change materials” (PCM) [1]), методом функционала электронной плотности выполнены расчеты зонной структуры с помощью программного комплекса WIEN2k [2].

Для иллюстрации результатов расчетов на рис. 1 приведено распределение электронной плотности для ромбоэдрической α-фазы соединения GeTe (пространственная группа № 160 R3m) в плоскостях, содержащих короткие (левая часть рисунка) и длинные (правая часть рисунка) связи Ge–Te.

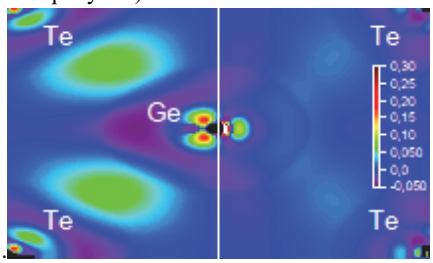


Рис. 1. Распределение электронной плотности в α-фазе GeTe, характеризующее силу связи между атомами Ge и Te.

С целью выявления природы химической связи и движущих сил фазовых превращений в PCM на основе выполненных расчетов электронной структуры проведен подробный анализ параметров критических точек [3] в распределении электронной плотности указанных соединений.

С.Г.С. выражает благодарность РФФИ за поддержку проведенных исследований (грант № 16-32-00107).

[1] Wuttig M., Yamada N. // Nature Mater., 2007, vol. 6, p. 824-832.

[2] Blaha P., Schwarz K., Madsen G., Kvasnicka D. and Luitz J. // *WIEN2k*, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2.

[3] Bader R. // Atoms in molecules. A quantum theory. 1990. Clarendon Press. Oxford.

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО КАРКАСНОГО БОРОАРСЕНАТА КАЛИЯ И НАТРИЯ $(K,Na)_2[As_2B_{12}O_{24}][B_2O(OH)_4]$

Панкова Ю.А., Кривовичев С.В.

Кафедра кристаллографии, Институт наук о Земле СПбГУ

e-mail: y.pankova.spbu@gmail.com

Настоящая работа посвящена синтезу и изучению кристаллической структуры нового соединения $(K, Na)_2[As_2B_{12}O_{24}][B_2O(OH)_4]$, не имеющего аналогов среди неорганических соединений и относящегося к новому структурному типу.

Игольчатые прозрачные бесцветные кристаллы $(K, Na)_2[As_2B_{12}O_{24}][B_2O(OH)_4]$ были получены с использованием борной кислоты в качестве флюса в закрытой системе (T=200 ºC, автогенное давление). Трехмерные наборы интенсивностей для монокристальных структурных исследований были получены на монокристальном дифрактометре Bruker «Kappa APEX DUO» (MoKα - излучение, CCD детектор). Кристаллическая структура была решена и уточнена в пакете программ SHELXL-97. Соединение триклинное, *P*-1, $Z = 1$, $a = 8.414(5)$, $b = 10.173(6)$, $c = 15.90(1)$ Å, $\alpha = 79.56(1)$, $\beta = 78.67(1)$, $\gamma = 70.91(1)^o$, $V = 1251(1)$ Å^3.

Кристаллическая структура соединения $(K,Na)_2[As_2B_{12}O_{24}][B_2O(OH)_4]$ представляет собой микропористый каркас из боратных цепочек, связанных между собой через тетраэдры $[AsO_4]$ (рис. 1). Боратные цепочки состоят из триборатных колец, образованных двумя треугольниками $[BO_3]$ и одним тетраэдром $[BO_4]$, соединяющимися между собой по вершинам через общие атомы кислорода. Атомы катионов K^+ и Na^+ находятся в крупных полостях каркаса. Также интересным представляется наличие в полостях каркаса протонированных электронейтральных диборатных комплексов $[B_2O(OH)_4]$, состоящих из двух треугольников $[BO(OH)_2]$, связанных общим атомом кислорода. Диборатные комплексы удерживаются в каналах структуры водородными связями и слабыми связями к катионам Na^+ и K^+.

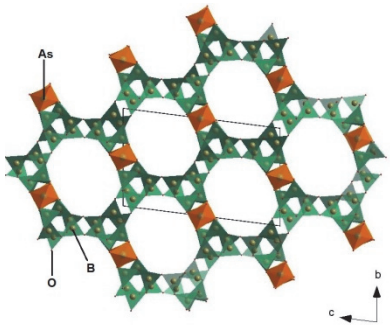


Рис. 1. Бороарсенатный каркас в кристаллической структуре $(K,Na)_2[As_2B_{12}O_{24}][B_2O(OH)_4]$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 14-05-00910). Исследования проведены в РЦ СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования».

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК SnO_2:Sb, ПОЛУЧЕННЫХ НА ГИБКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОДЛОЖКАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЛАЗЕРНОГО ОТЖИГА

Паршина Л.С.[1], Новодворский О.А.[1], Храмова О.Д.[1], Лотин А.А.[1], Васильев А.Л.[2], Михалевский В.А.[1], Черебыло Е.А.[1]

[1] ИПЛИТ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: ParshinaLiubov@mail.ru

В настоящее время пленки SnO_2:Sb на гибких органических подложках, получаемые при температурах, применимых для пластмассовой электроники, не обладают достаточными электрическими характеристиками [1]. Отжиг коротковолновым импульсным излучением эксимерного лазера, обеспечивающий локальное поглощение энергии является эффективной заменой обычного высокотемпературного отжига и позволяет улучшить характеристики пленок [2].

Основной задачей работы было получение высокопроводящих прозрачных в видимой области пленок SnO_2:Sb при комнатной температуре на подложках полиэтилентерефталата бескапельным методом импульсного лазерного осаждения при различных плотностях энергии на мишени и давлении кислорода в процессе осаждения, проведение постростового лазерного отжига полученных пленок и исследование их структурных и электрофизических характеристик до и после отжига. Рентгеновский дифракционный анализ показал, что пленки, выращенные при комнатной температуре подложки, рентгеноаморфные. Изменение кристаллической структуры пленок, подвергнутых лазерному отжигу, исследованы методом просвечивающей электронной микроскопии. Пленки SnO_2:Sb обладали высокой прозрачностью в спектральном диапазоне 400 - 700 нм. Установлено, что плотность энергии на мишени в процессе осаждения влияет на проводимость и пропускание пленок SnO_2:Sb. Минимум удельного сопротивления полученных пленок ($\rho \sim 5\cdot10^{-3}$ Ом·см) наблюдался при плотности энергии на мишени 5 Дж/см^2 и давлении кислорода в вакуумной камере в процессе осаждения 20 мТорр без применения постростового лазерного отжига. Применение постростового лазерного отжига с плотностью энергии на пленке от 20 до 40 мДж/см^2 для тонких пленок SnO_2:Sb, полученных при различных условиях осаждения, уменьшает удельное сопротивление низкоомных пленок SnO_2:Sb от 5 до 20 раз, а высокоомных в 300 раз. Минимальное достигнутое удельное сопротивление пленок SnO_2:Sb на органических подложках с применением лазерного отжига составило 1,2 10^{-3} Ом·см.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 14-07-00688, 14-47-03605, 15-38-20369, 15-29-01171, 15-07-04142, 15-07-03331, 15-07-03580, 16-29-05385, 16-07-00842.

[1] Lee S.U., Boo J.-H., Hong B. // Japanese Journal of Applied Physics, 2011, vol. 50, p. 01AB10-1-01AB10-5.

[2] Cranton W.M., Wilson Sh.L. et al. // Thin Solid Films, 2007, vol. 515, p. 8534–8538.

УСИЛЕНИЕ ПЬЕЗОСВОЙСТВ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЁНОК МУЛЬТИФЕРРОИКА НА МОРФОТРОПНОЙ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ

Пикин С.А.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: pikin@ns.crys.ras.ru

Показано, что на морфотропной фазовой границе (МФГ) возникают аномальные пьезоэлектрические свойства наноразмерных эпитаксиальных структур благодаря большому флексоэлектрическому эффекту на дислокационных стенках. На МФГ, характерной для многих материалов [1], наблюдается сосуществование различных фаз и происходит деление этих фаз до минимальных размеров. Этот минимальный размер l_c (наномасштаб) находится с помощью теории дислокаций [2], он совпадает с расстоянием между отдельными дислокациями в дислокационных стенках, много большим вектора Бюргерса b, независимо от вида кристаллического материала. С учетом размерных соотношений и экспериментальных данных о поворотах сегнетоэлектрических нанодоменов в мультиферроиках дана оценка флексоэлектрических коэффициентов $f \approx e/a$, где e – заряд электрона, a – параметр решетки, что совпадает с экспериментальными данными [3, 4]. Критическое значение $l_c \sim 10a$ определяет максимальный поворот нанодоменов как отношение b/l_c и измеряемую зависимость [5] флексоэлектрических коэффициентов $f \sim \chi_e^{1/2}$ от диэлектрической восприимчивости χ_e и плотности дислокаций.

[1] Dagotto E. // Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance. Springer Verlag. New York. 2003.

[2] Ж. Фридель. Дислокации. Пер. с англ. Мир. М. 1967 г.

[3] Cheng Cheng-En, Liu Heng-Jui, Dinelli Franco et al. // Sci. Rep. 2015. V. 5. P. 8091.

[4] Zubko P., Catalan G. & Tagantsev A. K. // Annu. Rev. Mater. Res. 43, 387 (2013).

[5] Yong Li, Longlong Shu,Wenbin Huang, Xiaoning Jiang and Hong Wang // APPL. PHYS. LETT. 105, 162906 (2014).

МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ZnO ПРИ СИЛЬНОТОЧНОМ МАГНЕТРОННОМ РАСПЫЛЕНИИ

Рабаданов М.Х., Исмаилов А.М., Рабаданов М.Р., Гамматаев С.Л., Алиев И.Ш., Эмирасланова Л.Л.

ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет»

e-mail: egdada@mail.ru

Мы проводим исследования по сильноточному магнетронному распылению самонагревающихся неохлаждаемых керамических мишеней ZnO. При больших плотностях разрядного тока (j> 60 мА/см^2) не припаянная к магнетрону мишень ZnO нагревается (при j=120 мА/см^2 ее температура достигает ~1000 ^{0}C) и ее поверхность подвергается существенной модификации [1].

В настоящей работе предлагается механизм формирования эпитаксиальных пленок ZnO при распылении «горячей» мишени ZnO. Наряду с атомарным потоком она эмитирует микрометровые частицы, которые попадая на ростовую поверхность, играют основную роль в процессах формирования эпитаксиальных пленок ZnO. На рисунке приведена морфология поверхности эпитаксиальной пленки ZnO. Подобные снимки дают представление о прерванной (из-за остановки процесса осаждения) последовательности стадий формирования пленки.

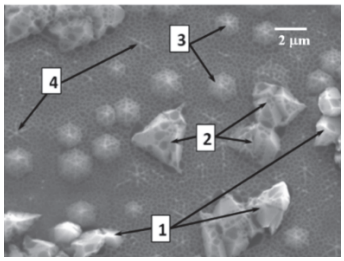


Рис.1. РЭМ-изображение эпитаксиальной пленки ZnO на (0001) Al_2O_3. 1- твердые микрочастицы, 2- микрочастицы в начальной стадии плавления, 3- «жидкоподобные» шестигранные островки, 4- кончики шестигранных микрокристалликов, составляющие полностью сформированный слой.

Микрочастицы только, что попавшие на ростовую поверхность не имеют определенной формы и находятся в твердой фазе (рис.1. частицы 1). С течением времени они приходят в тепловое равновесие с подложкой и плавятся (рис.1. частицы 2). Далее микрочастицы приобретает форму шестигранника (рис.1. частицы 3), с осью перпендикулярной растущей поверхности. На этом основании можно утверждать о базисной ориентации пленки ZnO, что действительно подтверждается методом дифракции быстрых электронов на отражение.

Таким образом, имеются достаточные основания для утверждения о том, что в методе магнетронного распыления для оксида цинка реализована кристаллизация по схеме «жидкость→кристалл».

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-02-00227.

[1] Кузьмичев А.И. Магнетронные распылительные системы. - Киев: Аверс, 2008.

ОСОБЕННОСТИ УПОРЯДОЧЕНИЯ КАТИОНОВ В СТРУКТУРАХ ВЕЗУВИАНОВ

Расцветаева Р.К.[1], Аксёнов С.М.[1,2], Чуканов Н.В.[3]
[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2]*Институт элементоорганических соединений РАН*
[3]*Институт проблем химической физики РАН*
e-mail: rast@ns.crys.ras.ru

С участием сотрудников Института кристаллографии открыто около 80 новых минералов, некоторые из которых послужили прототипами высокотехнологичных синтетических материалов и находят ряд других применений [1]. Перспективными являются, в частности, орто-диорто силикаты группы везувиана $X_{18}Y_{13}Z_{18}T_{0-5}O_{68}W_{10}$ где $^{[7,9]}X$=Ca; $^{[5,6]}Y$ =Al, Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Mn, Cu^{2+}, Ti и др.; Z=Si; $^{[3-4]}T$ = B, Al, Fe, □; W=OH, F, O. Их синтетические аналоги могут служить материалами для иммобилизации опасных отходов, включая токсичные и радиоактивные металлы [2]. Методом рентгеноструктурного анализа исследованы два потенциально новых минерала группы везувиана из глубинных пород Пакистана и из пород Валь-де-Оста. Особенность первого образца - повышенное содержание титана, а второго - повышенное содержание магния. Параметры тетрагональных ячеек: a=15.5326(2), c=11.8040(2)Å и a=15.545(2), c=11.819(1)Å, соответственно. Структуры уточнены до R=3.12 % [11247I>2σ(I)] и R=3.3% [2617|F|>4σ(F)]. Структура везувиана из Пакистана разупорядочена (пр.гр. $P4/nnc$), в то время как везувиан из Валь-де-Оста упорядочен (пр.гр. $P4/n$) и содержит вместо одной тетрагональной пирамиды с составом ($Fe^{2+}_{0.22}Fe^{3+}_{0.17}Mg_{0.11}$) – две ($Fe_{0.33}Mg_{017}$) и ($Fe_{0.42}Mg_{0.08}$), а вместо двух октаэдров ($Al_{3.59}Mg_{0.41}$) и ($Al_{4.03}Ti_{2.20}Fe^{3+}_{1.37}Fe^{2+}_{0.40}$) – четыре ($Al_2$), ($Al_2$), ($Al_{2.81}Mg_{0.86}Fe_{0.25}Mn_{0.08}$) и ($Al_{2.58}Mg_{0.8}Ti_{0.4}Cr_{0.1}Fe_{0.1}Mn_{0.02}$).

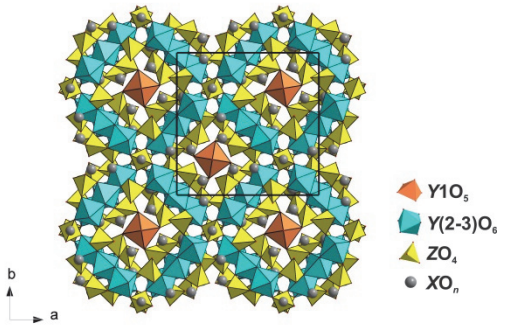


Рис.1. Структура везувиана.

[1] *Чуканов Н.В., Пеков И.В., Расцветаева Р.К.* // Успехи химии, 2004, том 73, № 3, с 227-246.

[2] *Tang, X. Y., Wang, S. Y., Yang, Y. et al.* // Chemical Engineering J, 2015, vol 275, p 198-205.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 16-35-60101-мол-а-дк и Президента МК-8033.2016.5.

МЕХАНИЗМ ДЕКАТИОНИРОВАНИЯ В НОВЫХ ГИДРАТИРОВАННЫХ МИНЕРАЛАХ ГРУППЫ ЭВДИАЛИТА

Розенберг К.А., Расцветаева Р.К., Аксёнов С.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: rast@ns.crys.ras.ru

Минералы группы эвдиалита - микропористые цирконосиликаты с широко варьирующим составом катионов [1], характеризуются сложными механизмами упорядочения и изоморфных замещений, в том числе Na и K на H_3O. При высокой степени гидратации оксониевые группы могут доминировать в цеолитных полостях структуры. В группе эвдиалита насчитывается около 17 гидратированных образцов. Методом рентгеноструктурного анализа изучены новые гидратированные представители – илюхинит и аналог расцветаевита («гидрорасцветаевит») из Хибинского щелочного массива, с горы Кукисвумчорр и Расвумчорр соответственно. Параметры гексагональных ячеек: a=14.1695(6), c=31.026(1) Å; a=14.2812(2), c=60.533(5) Å, пр.гр. $R3m$. Структура идюхинита уточнена до R=4.6% [1527 |F|>3σ(F)] [2], а гидрорасцветаевита до 5.9% [2068 |F|>3σ(F)] [3]. «Гидроэвдиалиты» обычно образуются при посткристаллизационной гидротермальной переработке «первичных» эвдиалитов. Таким образом, илюхинит $(H_3O,Na)_{14}Ca_6Mn_2Zr_3Si_{26}O_{72}(OH)_2\cdot 3H_2O$, вероятнее всего, является продуктом гидротермального преобразования манганоэвдиалита [2], а «гидрорасцветаевит» $[Na_{13}(H_3O)_{13}K_6]Ca_{12}Zr_6Fe_3MnSi_{52}O_{144}(OH)_5Cl_3$ является существенно декатионированным аналогом расцветаевита [1]. Оба минерала относятся к группе трансформационных минеральных видов, которые (по Хомякову) образуются путем твердофазных превращений соответствующих протофаз.

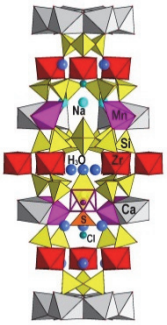


Рис. 1. Структура илюхинита.

[1] *Расцветаева Р.К., Чуканов Н.В., Аксенов С.М.* Минералы группы эвдиалита: кристаллохимия, свойства, генезис. Нижний Новгород: Изд-во НГУ, 2012. 229 с.

[2] *Чуканов Н.В., Расцветаева Р.К., Розенберг К.А. и др.* // ЗРМО, 2016, том 145б № 2б с 44-57.

[3] *Расцветаева Р. К., Аксенов С. М., Розенберг К. А.* // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 6. С. 897-905.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 16-05-00739_а.

СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Росляков И.В.[1], Пестриков П.П.[1], Левин Э.Е.[1], Кардаш Т.Ю.[2], Напольский К.С.[1]

[1] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

[2] Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН

e-mail: ilya.roslyakov@gmail.com

Пористые пленки анодного оксида алюминия (АОА) обладают системой цилиндрических каналов, расположенных перпендикулярно поверхности образца. Подобные структуры применяются в газоразделении и жидкостной фильтрации, в качестве матриц для формирования наноструктур, носителей для катализаторов и т.д. На практике к данному материалу предъявляются повышенные требования по химической и термической устойчивости, что достигается путем кристаллизации исходно аморфных оксидных пленок.

В ходе настоящей работы исследованы структура, фазовый и химический состав, а также кинетика кристаллизации АОА. Образцы получали анодным окислением металла в различных условиях: 0,3 М серная кислота при 25 В; 0,3 М щавелевая кислота при 40 В и 120 В; 0,1 М ортофосфорная кислота при 185 В. В качестве основного метода исследования в работе использована рентгеновская дифракция высокого разрешения в широком диапазоне векторов рассеяния с последующим анализом по методу радиального распределения атомов (РРА).

Исходные образцы АОА представляют собой рентгеноаморфный материал вне зависимости от условий получения. По данным *in-situ* дифракционных экспериментов при температуре 950 °C кристаллизация из аморфной фазы в высокотемпературную шпинель происходит в течение ~ 2 часов без образования промежуточных форм. На графиках РРА при отжиге постепенно возникают максимумы дальних порядков, что связано с упорядочением структуры. Радиальные распределения для конечных кристаллических модификаций АОА хорошо совпадают с аналогичной кривой для γ-Al_2O_3. Для образцов, полученных при различных условиях эксперимента, наблюдаются некоторые отличия на расстояниях более 10 Å, что может быть связано с различным размером кристаллитов.

СТРУКТУРНЫЕ АСПЕКТЫ ФОРМИРОВАНИЯ МЕТАМАГНЕТИЗМА В СОЕДИНЕНИЯХ RCo_2: ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Руткаускас А.В.[1], Козленко Д.П.[1], Бурзо Э.[2,3], Власик П.[2,4], Кичанов С.Е.[1], Лукин Е.В.[1], Савенко Б.Н.[1], Данг Н. Т.[5]

[1] Joint Institute for Nuclear Research

[2] Faculty of Physics, Babes-Bolyai University

[3] Romanian Academy, Cluj-Napoca Branch

[4] University of Medicineand Pharmacy «IuliuHatieganu», Physics Departament

[5]Center of Research and Development, Duy Tan University

e-mail: ranton@nf.jinr.ru

Соединения типа RCo_2 (R-редкоземельный металл) при нормальных условиях имеют кубическую структуру с пространственной группой $Fd\bar{3}m$ и являются парамагнетиками. При понижении температуры в этих соединениях обнаруживается ферримагнитное упорядочение, где кобальтовая подрешётка намагничивается (μ_{Co} ~1.0 μB) подрешёткой из редкоземельного элемента (R = Gd, Tb , Dy, Ho, Er , Tm). Исследования влияния давления на соединения RCo_2 могут дать дополнительную информацию о магнитном поведении кобальта в упорядоченных фаз.

В работе были проведены исследования соединений RCo_2 (где R – Ho, Er, Dy) методом нейтронной дифракции при высоких давлениях. Было установлено, что при нормальном давлении при понижении температуры появляется ферримагнитная фаза. При воздействии давления в соединениях $HoCo_2$ и $DyCo_2$ температура Кюри для редкоземельной (Ho и Dy) и кобальтовой подрешётки смещается в область низких температур синхронно. В соединении $ErCo_2$ при воздействии давления наблюдается расщепление температуры Кюри для эрбиевой и кобальтовой подрешёток. Температура Кюри для кобальтовой решётки смещается в область более низких температур, в то время как для эрбия температура Кюри остаётся неизменной. Этот экспериментальный результат требует расширения модели метамагнетизма.

Работа поддержана грантом РФФИ 15-32-20358-мол-а-вед

КАТИОННОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ-РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ В СТРУКТУРЕ ТАШЕЛГИТА

Сапегина А.В.[1], Расцветаева Р.К.[2], Аксёнов С.М.[2,3], Ананьев С.А.[4], Коноваленко С.И.[5]
[1]*Московский государственный университет*
[2]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[3]*Институт элементоорганических соединений РАН*
[4]*Сибирский федеральный университет*
[5]*Томский государственный университет*
e-mail: rast@ns.crys.ras.ru

Методом рентгеноструктурного анализа изучен ташелгит – сложный природный оксид Al, Mg, Ca и Fe из Восточной Сибири. Параметры ромбической ячейки: a=5.6973(1), b=17.1823(4), c=23.5718(5) Å, V=2307.5(7) Å^3. Анализ дифракционных данных допускал наличие ромбической симметрии кристалла при условии, что небольшая часть нарушающих ее достаточно сильных рефлексов (интенсивность до 25% от максимальной) исключается из массива. Структура решена прямыми методами в рамках пространственной группы *Pmcb* и уточнена до R=4.34% по 3482$|F|>4\sigma(F)$. Идеализированная формула (Z=8): $CaMgFe^{2+}Al_9O_{16}(OH)$. Ранее структура минерала исследована по тому же экспериментальному набору интенсивностей в моноклинном приближении [пр.гр. *Pc*, R=5.2%, 4773$|F|>7\sigma(F)$] [1]. Особенностью ромбической структуры является разупорядочение Fe и Mg по четырем тетраэдрическим позициям в разных пропорциях: одна позиция является преимущественно железной, другая - магниевой, а в двух оставшихся катионы распределены поровну и почти поровну (расстояния в M1-M4 тетраэдрах близки и находятся в пределах 1.882-1.993Å). Установленный нами факт наличия двух фаз в одном монокристалле ташелгита может свидетельствовать о динамических процессах кристаллизации минерала.

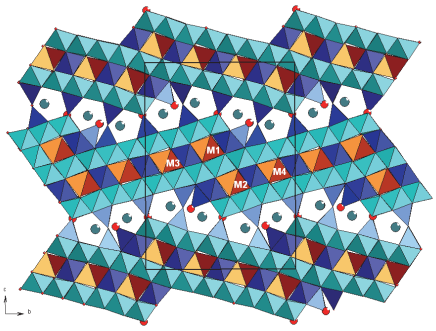


Рис.1. Структура ташелгита.

[1] *Расцветаева Р.К., Аксенов С.М., Верин И.А.* // Кристаллография, 2010, том 55, № 4, с 606-611.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 16-35-60101-мол-а-дк и Президента МК-8033.2016.5.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОТВЕРДОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ $K_2Co(SO_4)_2{\cdot}6H_2O$

Сизова Н.Л., Новикова Н.Е., Маноменова В.Л., Руднева Е.Б., Волошин А.Э.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsizova37@mail.ru

Кристаллы $K_2Co(SO_4)_2{\cdot}6H_2O$ (KCSH) относятся к семейству кобальтовых солей Туттона, из которых могут быть изготовлены эффективные зонные фильтры в УФ-области спектра [1]. Представляет интерес комплексное исследование свойств этих кристаллов, в том числе механических.

Методом индентирования по Виккерсу на приборе ПМТ-3 при комнатной температуре при нагрузках 10–30 г изучена микротвердость плоскостей (010) и (001) кристалла KCSH, выращенного методом снижения температуры из низкотемпературных растворов. Ее значения составили 1150 и 1300 МПа соответственно при двух различных ориентациях диагонали индентора относительно главных кристаллографических осей. В кристалле KCSH отсутствует анизотропия микротвердости первого рода, анизотропия микротвердости второго рода невелика: K_2 = 1.13.

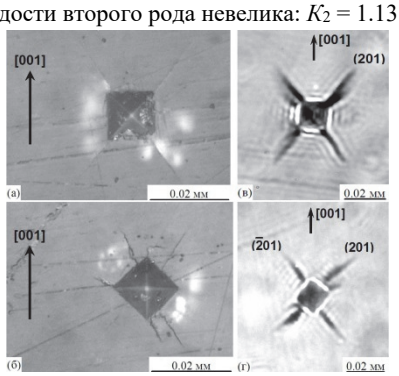


Рис. 1. Картины индентирования по Виккерсу (P = 20 г) в отраженном (а, б) и проходящем (в, г) свете плоскости (010) кристалла KCSH при ориентации диагонали индентора относительно плоскости (001): под углом 45° (а, в); параллельно (б, г).

Трещины по плоскостям спайности {201} образуются, когда диагональ индентора Виккерса лежит в плоскости (001) (рис. 1г). При ориентации индентора под углом 45° к (001) (рис. 1в) одна трещина лежит в плоскости спайности, а вторая образуется вследствие высокой концентрации напряжений, возникающих у угла индентора. При индентировании сферическим индентором плоскости (010) кристалла KCSH, в отсутствие напряжений, появляются трещины только по плоскостям спайности {201}. Таким образом, метод индентирования наконечниками различной формы позволяет не только получить величины микротвердости кристалла, связанной с пластической деформацией, но и понять геометрию его разрушения.

[1] Дятлова Н.А., Маноменова В.Л. и др. // Кристаллография, 2013, том 58, № 5, с. 737–743.

КРИТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ СДВИГОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Скворцова Н.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: skvortsova49@mail.ru

Явление высокотемпературной суперлокализация пластической деформации впервые открыто примерно три десятилетия тому назад в Институте кристаллографии РАН в неметаллических кристаллах [1]. Эффект проявляется в деформационном расслоении кристаллов на локальные зоны интенсивного сдвигообразования при температурах выше половины абсолютной температуры плавления. Величина деформации в полосах локализованного сдвига (ПЛС) составляет ~10^3-10^4 % в ионных [1, 2] и ~10^2 % в ионно-ковалентных кристаллах [3, 4] при средней деформации образца менее 10%. В работе [5] впервые обнаружены проявления локализации деформации в ковалентных кристаллах парателлурита при температуре T > 900 K. Выявлены различные каналы потери устойчивости деформации: высокотемпературный “зуб” текучести, прерывистое немонотонное течение и глобальная потеря устойчивости, проявляющаяся в катастрофическом развитии трещин и разрушении материала при деформации ε > 10 % [6]. Фактически речь идет о новой моде потери устойчивости деформируемого кристалла с переводом его пластического течения в автокаталитический режим сильно коррелированного движения больших групп дислокаций [6].

Целью настоящей работы является исследование критических условий реализации сдвиговой неустойчивости пластической деформации при высокотемпературном нагружении кристаллов α-TeO_2.

Механические испытания образцов проводились на машине Инстрон в интервале температур T=733–993 K (0.73 – 0.99) T_m (T_m – температура плавления) на воздухе в специальном реверсе с рубиновыми пуансонами. Скорость перемещения пуансонов при сжатии была $0.83\cdot10^{-6}$ м/с, что соответствовало скорости деформации $1.05\cdot10^{-4}$ c^{-1}. Получены диаграммы “напряжение – пластическая деформация” σ(ε), из которых определялись критические параметры неустойчивого пластического течения (ε_{cr}, σ_{cr}). Структура образцов после высокотемпературной деформации изучалась методами оптической и интерференционной микроскопии. Все микроструктурные наблюдения выполнены на боковых гранях деформированных образцов.

Показано, что величина критических напряжений σ_{cr} обнаруживает устойчивую тенденцию к снижению с повышением температуры деформирования в кристаллах с ориентацией оси сжатия вдоль [110] и [221] направлений. Величина энергии активации формирования локальных сдвигов, определенная по наклону зависимости ln σ_{cr} (1/T), равна ~ 0.41 и ~ 0.81 eV для образцов, ориентированных вдоль [110] и [221] соответственно. Показано, что изменение кристаллографической ориентации образцов от [110] к [221] приводит к двукратному увеличению величины энергии активации локализованной деформации. Таким образом, монокристаллы TeO_2 демонстрируют достаточно сильную ориентационную зависимость энергии активации неустойчивого пластического течения в ПЛС. Существенное отличие энергии активации образования локальных микросдвигов связано, по-видимому, с различной степенью деформационного измельчения нанозерен в ПЛС и формированием нанокристаллической структуры в локальных областях кристаллов, ориентированных вдоль кристаллографических направлений [110] и [221]. Физический механизм локализованной деформации основывается на представлениях о спонтанной самоорганизации дефектной структуры в ПЛС [3-6].

[1] Бережкова Г.В., Скворцова Н.П., Регель В.Р., Перстнев П.П. // ФТТ, 1984, том 26, № 4, с. 1074-1079.

[2] Скворцова Н.П. // Кристаллография, 2002, том 47, № 4, с. 697-701.

[3] Скворцова Н.П. // ФТТ, 2006, том 48, № 1, с. 70-73.

[4] Скворцова Н.П., Кривандина Е.А., Каримов Д.Н. // ФТТ, 2008, том 50, № 4, с. 639-643.

[5] Скворцова Н.П., Ломонов В.А., Виноградов А.В. // Кристаллография, 2011, том. 56, № 1, с. 72-76.

[6] Скворцова Н.П. // Вестник Тамбовского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки, 2013, том 18, вып. 4, часть 2, с. 1652-1654.

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ $LiNbO_3$

Скрылева Е.А., Кубасов И.В., Сенатулин Б.Р.,
Закутайлов К.В., Козяр К.А., Пархоменко Ю.Н.
НИТУ «МИСиС»
e-mail: easkryleva@gmail.com

Изучение композиционной перестройки поверхности кристаллов сегнетоэлектриков под внешним воздействием приобретает существенное значение при их использовании в таких специфических приложениях, как активация заряженных биомолекул, искусственный фотосинтез, поляризация электрооптических полимеров, обратимая фрагментация и самосборка нематических жидких кристаллов, [1].

В работе проведены эксперименты по механической обработке поверхности кристаллов $LiNbO_3$ конгруэнтного состава *Z*-, *Z*+ и *X* срезов стандартными методами шлифовки и полировки и методом сухой шлифовки одноименным кристаллом. Химический состав поверхности кристаллов до и после обработки анализировали методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Было установлено, что отношение катионов Li/Nb заметно уменьшается при стандартной обработке и заметно увеличивается при сухой обработке. Для определения Li/Nb использовали методику, основанную на измерении интегральных интенсивностей линий Li1s и Nb4s, рис. 1. Было также обнаружено, что механическая обработка приводит к появлению в спектре O1s дополнительного пика от неструктурного кислорода (532,1 эВ) и к увеличению концентрации адсорбированного углерода. При увеличении Li/Nb в спектре углерода C1s появлялся пик от CO_3^{2-} (289,5 эВ). На основании полученных результатов предположили, что

композиционная перестройка связана с образованием на поверхности кристалла химических соединений на основе лития (LiOH и Li_2CO_3), что приводит к обеднению поверхности литием в случае удаления продуктов реакции или к увеличению Li/Nb в случае их накопления.

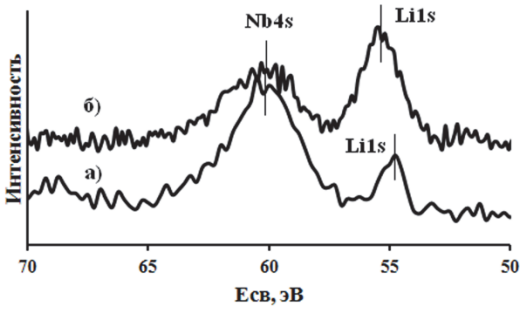


Рисунок 1 Спектры Li1s и Nb4s на поверхности $LiNbO_3$: а)- исходная поверхность, б)- после обработки сухой шлифовкой

[1] S. Sanna, R. Hölscher, W.G. Schmidt // Appl. Surf. Sci., 2014, 301, 70−78

СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛОВ $SmFe_3(BO_3)_4$ И $(Sm_{0.95}Bi_{0.05})Fe_3(BO_3)_4$

Смирнова Е.С.[1], Алексеева О.А.[1], Верин И.А.[1], Артемов В.В.[1], Япаскурт В.О.[2], Безматерных Л.Н.[3], Гудим И.А.[3], Фролов К.В.[1], Любутин И.С.[1]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Геологический факультет МГУ

[3] Институт физики СО РАН, Красноярск

e-mail: esmi@crys.ras.ru

Разнообразие свойств редкоземельных ферроборатов $RFe_3(BO_3)_4$, относящихся к классу мультиферроиков, обусловлено наличием в них двух типов магнитных ионов – железа и редкоземельных элементов.

Монокристаллы $SmFe_3(BO_3)_4$, выращены методом кристаллизации из растворов-расплавов, содержащих (I) и не содержащих (II) $BiMo_3O_{12}$. Химический состав соединений был определен методом рентгеновского энергодисперсионного элементного анализа. Установлено, что в составе (I) имеется примесь Bi.

Монокристаллы (I) и (II) исследованы методом рентгеноструктурного анализа. Полные наборы интенсивностей дифракционных отражений при температуре 293 K получены для монокристаллов (I) и (II) на четырехкружном дифрактометре CCD Xcalibur S.

Параметры элементарной ячейки кристалла с висмутом a = 9.5742(1) Å, c = 7.5957(1) Å больше параметров ячейки беспримесного кристалла a = 9.5592(1) Å, c = 7.5783(1) Å, что обусловлено разницей ионных радиусов. Анализ заселенности позиций и карт остаточной электронной плотности в структуре (I) позволил выявить атомы Bi в позиции Sm. Уточненная формула соединения (I) по результатам рентгеноструктурного анализа $Sm_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$. В структуре (II) аналогичный анализ примесных атомов не выявил. Установлено, что характерные расстояния Sm–O, Fe–O и расстояния Fe–Fe в цепочках FeO_6 и между ними различаются для изученных структур (I) и (II).

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 14-02-00483.

ПОДТВЕРЖДЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКТАЭДРО-КУБИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ ДЕФЕКТОВ ИЗ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ ФТОРНЫХ ПОЗИЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$

Сорокин Н.И., Голубев А.М., Соболев Б.П.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Данные рентгеноструктурного анализа упорядоченных фаз $Ba_4R_3F_{17}$ (R = Yb, Y) [1] указывают на образование в их структуре октаэдро-кубических кластеров (ОКК) $\{Ba_8R_6F_{69}\}$. Однако состав $Ba_4R_3F_{17}$ (42.86 мол. % RF_3) находится вне области гомогенности нестехиометрических фаз $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$ (0–32 мол. % YbF_3, 0–35 мол. % YF_3). Для подтверждения ОКК в фазах $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$ были проанализированы структурные данные (тип и заселенность фторных позиций), полученные в ИК РАН (обзор работ приведен в [2, 3]) для кристаллов с 31 % LaF_3, 26 % CeF_3, 27 % PrF_3, 22 % NdF_3, 9% DyF_3, 10 и 20 % HoF_3, 25 и 37.5 % ErF_3, 22 % TmF_3, 16.5 % YbF_3, 10 и 18 % LuF_3, выращенных по одной ростовой методике. Фторы располагаются в основных позициях *8c* и междоузельных позициях *48i* и *4b*. На рис. 1 показаны экспериментальные заселенности (в расчете на одну формульную единицу флюорита) Q_{exp} фторных позиций *8c* и *48i* + *4b* и рассчитанные заселенности Q_{cal} этих позиций, исходя из образования ОКК $\{Ba_8R_6F_{69}\}$.

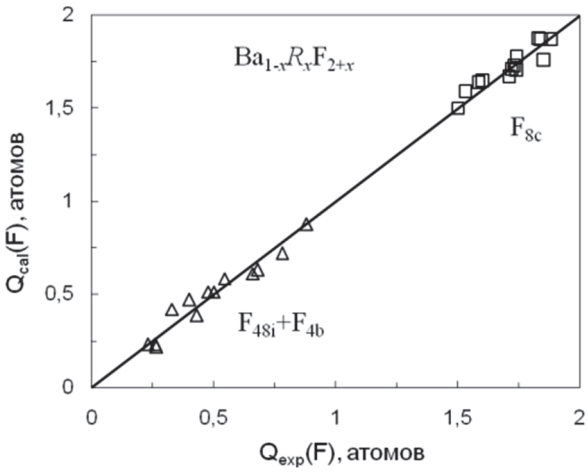


Рис. 1. Корреляция между заселенностями Q_{exp} и Q_{cal} фторных позиций для кристаллов $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$.

Хорошая корреляция (рис. 1) показывают применимость ОКК кластеров для описания дефектного строения кристаллов $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$. Проведенный в [3] совместный анализ данных структурных и кондуктометрических исследований кристаллов $Ba_{1-x}R_xF_{2+x}$ указывает на модель кластерного строения на основе ОКК: $\{Ba_{14}F_{64}\}^{36-} \rightarrow \{Ba_8R_6F_{69}\}^{35-} + F_{mob}^-$, где F_{mob}^- - подвижный фтор.

Работа выполнена по НИР № 01291153836 ИК РАН «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Максимов Б.А., Соланс Х. и др. // Кристаллография, 1996, том 41, № 1, с. 51–59.

[2] Соболев Б.П., Голубев А.М. и др. // Кристаллография, 2003, том 48, № 1, с. 148–169.

[3] Сорокин Н.И., Голубев А.М. и др. // Кристаллография, 2014, том 59, № 2, с. 275–285.

ВЗАИМОСВЯЗЬ ФТОР-ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ФЛЮОРИТОВЫХ $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ И ТИСОНИТОВЫХ $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ КРИСТАЛЛОВ

Сорокин Н.И., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

На примере системы SrF_2–LaF_3 впервые построена зависимость фтор-ионной проводимости σ_{dc} для всего интервала составов (0–100 мол. % LaF_3) нестехиометрических фаз $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ типа флюорита, $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ типа тисонита (LaF_3) и эвтектики $70LaF_3{\times}30SrF_2$ (мол. %). Все σ_{dc}-измерения проведены на монокристаллах $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$, $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ и эвтектическом композите, полученных кристаллизацией расплава в одинаковых ростовых условиях (реактивы, фторирующая атмосфера, температурные режимы кристаллизации и охлаждения) [1–3].

Значения σ_{dc} кристаллов тисонитовой фазы $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ выше, чем у флюоритовой $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ во всем интервале составов (рис. 1). Структурный тип тисонита более благоприятен для фтор-ионного транспорта, чем тип флюорита. Для фаз обоих типов структуры вблизи компонентов наблюдаются изломы. Между составами, отвечающими изломам (15 и 95 мол. % LaF_3), значения $\lg\sigma_{dc}$ обеих фаз ложатся на одну прямую с разрывом в двухфазной области. Проводимость эвтектического композита хорошо укладывается на эту зависимость.

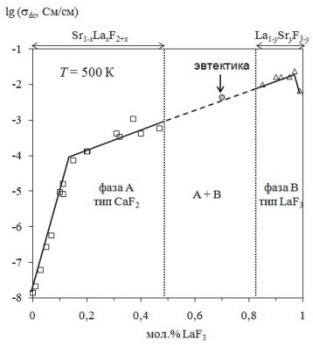


Рис. 1. Ионная проводимость при 500 К фаз $Sr_{1-x}La_xF_{2+x}$ *и* $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ *и эвтектического состава* $70LaF_3{\times}30SrF_2$.

Наблюдаемая корреляция σ_{dc} для фаз разных типов структуры указывает на кристаллохимическую взаимосвязь дефектных анионных подрешеток кристаллов с одинаковым качественным катионным составом (Sr, La).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 14-03-00178 и 16-03-00707).

[1] Иванов-Шиц А.К., Сорокин Н.И. и др. // ФТТ, 1983, том 39, № 1, с. 114–118.

[2] Сорокин Н.И., Соболев Б.П. // Кристаллография, 1994, том 39, № 5, с. 889–893.

[3] Сорокин Н.И., Соболев Б.П. // Кристаллография, 1996, том 41, № 3, с. 518–521.

МОДЕЛЬ СТРУКТУРНОГО КЛАСТЕРА ДЕФЕКТОВ В СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКАХ $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ (ТИП LaF_3)

Сорокин Н.И., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Зависимость фтор-ионной проводимости σ_{dc} кристаллов $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ (R – РЗЭ, M – ЩЗЭ) со структурой тисонита (LaF_3) от состава (y) проходит через максимум на y_0 = 3–5 мол. % MF_2 [1, 2]. Одной из причин падения $\sigma_{dc}(y)$ при $y > y_0$ может быть агрегация дефектов, захватывающая подвижные вакансии V_F^+ в структурные кластеры. Кластеры дефектов характерны для флюоритовых фаз $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ (x = 1–y).

Структурный тип LaF_3 имеет две формы: тригональную (пр. гр. $P\bar{3}c1$) и гексагональную (пр. гр. $P6_3/mmc$). Первая содержит 3 фторных позиции: F1(12g), F2(4d) и F3(2a). В гексагональной форме позиции F2 и F3 объединяются. Подвижные вакансии преимущественно образуются в F1-позициях (V_{F1}^+).

Впервые предложена модель возможного структурного кластера точечных дефектов в нестехиометрических тисонитовых фазах $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ (рис. 1).

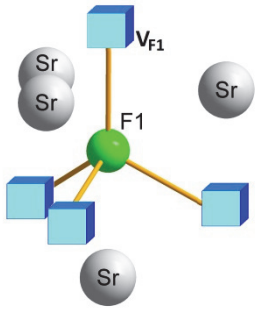


Рис. 1. Кластер дефектов в тисонитовой структуре.

Кластер образован 4 M^{2+} в позициях R^{3+} (M_R^-) и 4 вакансиями V_{F1}^+ и электронейтрален. В его центре находится решеточной F1 (не являясь дефектом). Его окружают 4 вакансии F1 на расстояниях 2.6, 2.65, 2.77 и 2.78 Å, образуя тетраэдр. И дальше по тетраэдру расположены 4 M^{2+}, поэтому кластер можно назвать тетраэдрическим. Катионные M_R^- и анионные V_{F1}^+ дефекты в кластере сильно связаны и не участвуют в ионном транспорте. Центральный фтор F1 попадает в большую пустоту, но совершает локальные движения, не давая вклад в σ_{dc}.

Проводимость $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ определяется делокализованными (подвижными) вакансиями V_F^+, не входящими в кластеры. Являясь ловушками носителей заряда V_{F1}^+, кластеры приводят к снижению σ_{dc} при $y > y_0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 14-03-00178 и 16-03-00707).

[1] Соболев Б.П., Сорокин Н.И. // Кристаллография, 2014, том 59, № 4, с. 609–622.

[2] Сорокин Н.И., Соболев Б.П. // Кристаллография, 2015, том 60, № 1, с. 123–129.

РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИИ РОСТА ВЫСОКООДНОРОДНЫХ КРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Стрелов В.И.[1], Прохоров И.А.[1], Коробейникова Е.Н.[1], Сидоров В.С.[1], Власов В.Н.[1], Артемьев В.К.[2]

[1] Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»

e-mail: enkorob@mail.ru

Современные тенденции развития электроники, связанные с миниатюризацией, повышением степени интеграции микросхем и надежности их работы, требуют повышения структурного совершенства и однородности распределения свойств полупроводниковых кристаллов. Известно, что для достижения высокой однородности свойств легированных кристаллов на микро- и макроуровне необходимо уменьшать интенсивность конвективных течений в расплаве и приближаться к условиям диффузионного тепломассопереноса.

На основании расчетно-экспериментальных исследований при выращивании монокристаллов полупроводников (GaSb(Te,Si) и Ge(Ga)) методом вертикальной направленной кристаллизации, установлено, что минимизация радиального температурного градиента и устранение свободной поверхности расплава (конвекции Марангони) приводят к уменьшению интенсивности конвективных течений и, соответственно, повышению микрооднородности распределения примеси. Однако при этом для достижения макрооднородности свойств необходимость учитывать вид легирующей примеси, т.е. коэффициент ее сегрегации и диффузии. При соблюдении совокупности этих требований даже приближение к условиям диффузионного массопереноса (стационарный режим тепловой конвекции) делает процесс кристаллизации управляемым, предсказуемым (т.е. с большой степенью вероятности расчетным) и воспроизводимым, что в конечном итоге обеспечивает высокую однородность на микро- и макроуровне выращиваемых кристаллов.

Сделанные выводы подтверждаются, в том числе, характеристиками термофотоэлектрических преобразователей (ТФЭП), изготовленных на подложках GaSb:Te с более высокой однородностью свойств. Они превосходят аналогичные характеристики ТФЭП на подложках с меньшей однородностью свойств.

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И МИКРОСТРУКТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ В NIO И MNO

Сумников С.В.[1], Балагуров А.М.[1], Бобриков И.А.[1], Васин Р.Н.[1], Миронова-Ульман Н.[2]

[1]Объединенный институт ядерных исследований

[2]Institute of Solid State Physics, University of Latvia

e-mail:sumnikovsv@gmail.com

Для установления взаимосвязи между структурой и магнитными свойствами простых оксидов были изучены магнито-структурные фазовые переходы в NiO и MnO методом нейтронной дифракции. Полное разделение антиферромагнитных и ядерных дифракционных пиков этих оксидов делает возможным детальный анализ температурных зависимостей атомных и магнитных фазовых переходов. Также было изучено влияние уменьшения размера кристаллитов на магнитную структуру простых оксидов. Для этого методом нейтронной дифракции были исследованы 4 образца NiO с различным размером микрокристаллитов.

Эксперименты проводились в широком диапазоне температур на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР), расположенного реакторе ИБР-2. ФДВР обладает разрешением $\Delta d/d \approx 0.001$, что позволяет прецизионно исследовать малые ромбоэдрические искажения кристаллической структуры, возникающие в NiO. В обоих оксидах структурный переход характеризуется понижением симметрии из кубической в ромбоэдрическую, а магнитный переход образованием антиферромагнитной структуры G-типа.

Из полученных дифракционных данных были определенны температуры структурных и магнитных переходов, выяснены температурные зависимости для величины ромбоэдрического искажения и упорядоченного магнитного момента. Установлено, что в MnO структурный и магнитный переходы происходят при одинаковых температурах ($T_N = T_{STR} \approx 123$ K). Однако в NiO магнитный переход происходит при более высокой температуре ($T_N \approx 539$ K), чем структурный ($T_{STR} \approx 483$ K). Предлагается теоретическая модель, описывающая разницу в температурах ($\Delta T \approx 56$ K) структурного и магнитного перехода. Для образцов NiO с размером микрокристаллитов 100 нм и менее наблюдается резкое уменьшение когерентной области магнитного рассеяния по сравнению с когерентной областью ядерного рассеяния. Для описания этого явления была предложена модель оболочка ядро.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛЯРНОЙ МОЛЕКУЛЫ $C_{60}F_{18}$ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЕЁ АДСОРБЦИИ НА Au (111)

Суханов Л.П., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Меньшиков К.А., Свечников Н.Ю., Станкевич В.Г.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: sukhanov1955@mail.ru

Для адекватного описания адсорбции и самоорганизации полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на поверхности Au(111) [1] необходимо знать электронные и электрические свойства отдельной молекулы: её электрический дипольный момент (ЭДМ), распределение электростатического потенциала (ЭП) и напряжённостей электрического поля в широкой области пространства. В рамках различных методик теории функционала плотности (ТФП) мы впервые рассчитали упомянутый перечень свойств с контролируемой точностью.

На основе разных приближений ТФП получена достоверная величина ЭДМ молекулы $C_{60}F_{18}$ в диапазоне от 10 до 11 Д. Для двух взаимно перпендикулярных осей x и y (ось z совпадает с направлением ЭДМ молекулы, начало координат – с её электростатическим центром тяжести) при $z = 0$ (рис. 1) построено распределение ЭП $\Phi(x)$, $\Phi(y)$ и z-компоненты напряжённости электрического поля $E_z(x)$, $E_z(y)$. Положительный ЭП сосредоточен внутри углеродного каркаса молекулы, принимая малые отрицательные значения за его пределами. Зависимости $E_z(x)$ и $E_z(y)$ соответствуют анизотропному распределению электрического поля во внутримолекулярной области пространства. Они носят осциллирующий характер, достигая максимума $+3{,}3\cdot10^8$ В/см для $E_z(x)$ и минимума $-5{,}5\cdot10^8$ В/см для $E_z(y)$ вблизи внутренней границы каркаса. За пределами границы каркаса по мере удаления от центра молекулы напряжённости $E_z(x)$ и $E_z(y)$ стремятся к изотропному распределению, описываемому формулой дипольного приближения, справедливой на больших расстояниях от центра молекулы по сравнению с её размером. Однако известное приближение точечного диполя здесь выполняется с точностью 30% уже на расстояниях, вдвое больших размера молекулы.

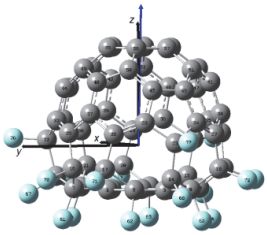


Рис.1. Пространственная структура молекулы $C_{60}F_{18}$.

Выявленная в [1] физическая адсорбция молекулы $C_{60}F_{18}$ на поверхности Au(111) предполагает малое возмущающее воздействие поверхности на саму молекулу. Это позволило нам сравнить рассчитанные по ТФП распределения электронной плотности высшей занятой и низших вакантных молекулярных орбиталей с их образами, полученными в [1] с помощью сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии.

[1] Bairagi K., Bellec A., Chumakov R.G., et al. // Surf. Sci., 2015; V. 641, p. 248-251.

АРИСТОТИПЫ КАТИОННОГО И АНИОННОГО ПОРЯДКА В ПЕРОВСКИТАХ: ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Таланов М.В.[1], Широков В.Б.[1,2], Таланов В.М.[3]
[1]Южный федеральный университет
[2]Южный научный центр РАН
[1]Южно-Российский государственный политехнический университет
e-mail: tmikle-man@mail.ru

Теоретико-групповым методом исследовано атомное упорядочение в структуре кубического перовскита. Установлена возможность существования 13 упорядоченных фаз в позиции 1(*a*) (в том числе четыре бинарных, две тройных и пять четверных катионных сверхструктур), 13 фаз с различным типом порядка в позиции 1(*b*) (в том числе четыре бинарных, две тройных и пять четверных катионных сверхструктур) [1].

Установлена возможность существования 121 фазы с одновременным упорядочением катионов в 1(*a*)- и 1(*в*)-позициях структуры перовскита. Показано, что 53 фазы описываются несобственными параметрами порядка, связанными с упорядочением катионов, образование 56 фаз связано с несобственными вращениями октаэдров, 15 фаз являются несобственными сегнетоэлектриками [2].

Показана возможность существования 261 анионных сверхструктур, включая пять бинарных и 14 тройных сверхструктур [3].

Предложена классификация аристотипов катионного и анионного порядка и приведены расчетные структуры некоторых типов упорядоченных низкосимметричных модификаций перовскитов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 16-32-60025 «мол а_дк

[1] Таланов В. М., Таланов М. В., Широков В. Б. // Кристаллография, 2014, 59, № 5, с. 718–730.

[2] Таланов М. В., Широков В. Б., Таланов В. М. // Кристаллография, 2014, 59, № 5, с. 731–748.

[3] Talanov M. V., Shirokov V. B., Talanov V. M. // Acta Cryst. , 2016, A72, p. 222–235

ПОСТРОЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СИСТЕМЫ $ZnSiAs_2$-MnAs

Федорченко И.В.[1,2], Рабинович О.И.[1], Маренкин С.Ф.[2], Рил А.И.[2], Диденко С.И.[1], Леготин С.А.[1], Краснов А.А.[1], Skupinski P.[3], Kilanski L.[3], Dobrowolski W.[3]
[1] НИТУ МИСиС
[2] Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
[3] Институт физики, Польская академия наук
e-mail: rawork2008@mail.ru

Изучение фазовых равновесий в системе полупроводник-ферромагнетик дает возможность формирования спин-зависимых структур. В качестве объекта исследования была выбрана пара полупроводник-$ZnSiAs_2$ и ферромагнетик-MnAs. Разница в параметрах решетки $ZnSiAs_2$ и Si менее 2 %, что позволяет создавать тонкие пленки на основе соединения на кремниевой подложке. Из-за большой ширины запрещенной зоны, в системе возможно получить как гигантское магнитное сопротивление, так и туннельное магнитосопротивление.

Для построения фазовой диаграммы $ZnSiAs_2$-MnAs, были синтезированы образцы с концентрацией от 0 до 100 % MnAs. Идентификация образцов проводилась с помощью рентгенофазового анализа (РФА), дифференциального термического анализа (ДТА) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). По данным РФА все образцы содержали только указанные фазы (рис. 1). Изменение параметров решетки наблюдалось в третьем знаке, что говорит о незначительной взаимной растворимости соединений.

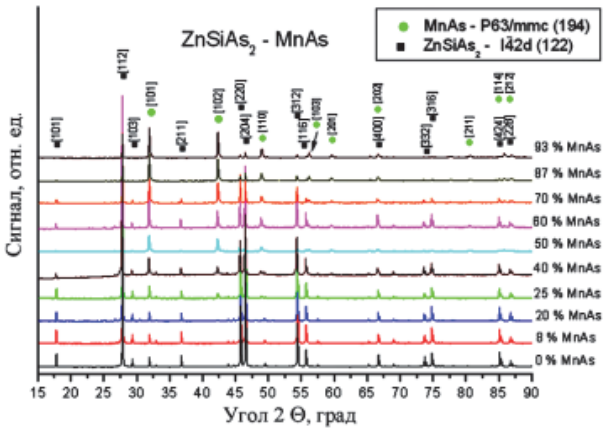


Рис.1. Рентгенограммы соединений (1-x) $ZnSiAs_2$ + xMnAs

ДТА проводился на модернизированном Дериватографе Q-1000 в запаянных сосудах Степанова. Образцы нагревали со скоростью 10 °С/мин до 1150 °С. Самые высокие температурные эффекты были интерпретированы как линии ликвидуса, а следующая линия как эвтектическая температура. Данные СЭМ подтверждаются измерениями РФА и ДТА. Образец эвтектического состава был двухфазным, при этом включения полупроводника располагались в ферромагнитной матрице.

На основе проведенных исследований можно сделать вывод, что изученный разрез является квазибинарным. Построена фазовая диаграмма $ZnSiAs_2$-MnAs (рис. 2).

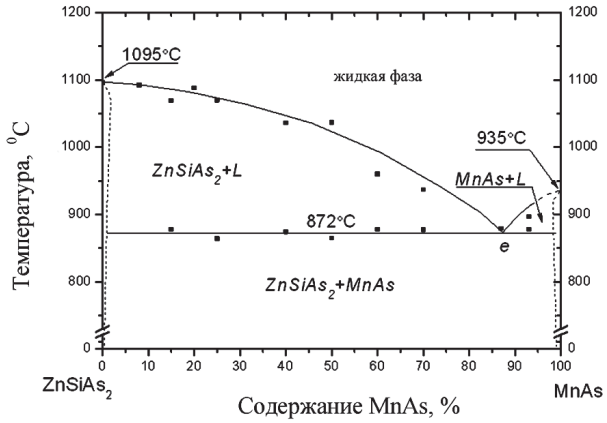


Рис.2. Фазовая диаграмма системы $ZnSiAs_2$-MnAs

ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $CsMMoO_6$ (M = Nb, Ta)

Фукина Д.Г.[1], Сулейманов Е.В.[1], Фукин Г.К.[2], Титаев Д.Н.[1], Боряков А.В.[1], Лякаев Д.В.[1], Борисов Е.Н.[3]
[1] *ННГУ им. Н.И. Лобачевского*
[2] *ИМХ РАН им. Г.А. Разуваева*
[3] *СПбГУ*
e-mail: dianafuk@yandex.ru

В данной работе методом раствора в расплаве были выращены монокристаллы дефектных пирохлоров $CsMMoO_6$ (M = Nb, Ta). Средний размер кристаллов составляет 50 мкм для $CsNbMoO_6$ и 12 мкм для $CsTaMoO_6$. Их состав был подтвержден рентгенофлуоресцентным методом (РФлА). Для установления того, что не образуются обогащенные фазы или кристаллы с преимущественным содержанием Nb (Ta) или Mo были получены карты распределения элементов. Структуры были расшифрованы методом рентгеноструктурного анализа (РСА). Оба кристалла при комнатной температуре имеют кубическую сингонию с нецентросимметричной пространственной группой F-43m. Структуры состоят из трехмерного каркаса, образованного октаэдрами $[MO_6]$ (M = Mo, Nb, Ta). Атомы Mo^{6+} и Nb^{5+}/Ta^{5+} занимают одинаковые кристаллографические позиции и распределены по ним статистически в соотношении 1:1. На полученных образцах была зафиксирована генерация второй гармоники (ГВГ). Обнаружено, что интенсивность сигнала по отношению к интенсивности сигнала ниобата лития ($LiNbO_3$) составила $I_{2\omega}$ ($CsNbMoO_6$) ~ 1.6×10^{-2} $I_{2\omega}$ ($LiNbO_3$) и $I_{2\omega}$ ($CsTaMoO_6$) ~ 8.5×10^{-4} $I_{2\omega}$ ($LiNbO_3$).

Кроме того, при нагревании сигнал ГВГ пропадает, что связано с фазовым переходом, при котором происходит упорядочивание структуры, и она приобретает центр инверсии. Это подтверждается высокотемпературным рентгенофазовым анализом (РФА). При нагревании образца до температуры фазового перехода на рентгенограмме исчезают пики (402) и (820), которые принадлежат пространственной группе F-43m, и рентгенограмма приобретает вид типичный для пространственной группы Fd-3m. Температуры фазовых переходов были зафиксированы методом ДСК. Перестройка структуры заключается в малых подвижках атомов кислорода.

ДИНАМИКА ПЕРЕХОДА СТРУКТУРНОЙ СИММЕТРИИ ОТ *P3c1* К *P6/ммс* В КРИСТАЛЛАХ ТИСОНИТОВЫХ ФАЗ $R_yM_{1-y}F_{3-y}$ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ($0 \le y \le 0.15$) И КАЧЕСТВЕННОГО (*R*, *M*) СОСТАВОВ (*R* = La, Ce, Pr, Nd; *M*=Ca, Sr, Ba)

Черная Т.С., Болотина Н.Б., Верин И.А.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: tscherts@gmail.com

В работе методами РСА изучены двухкомпонентные нестехиометрические тисонитовые фазы $R_{1-y}M_yF_{3-y}$, перспективные для приложений благодаря ион-проводящим свойствам, сильно зависимым от состава [1]. Цель данной работы – исследование влияния качественного и количественного составов на структурные характеристики фаз.

Пространственная симметрия соединений $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ представлена двумя формами: упорядоченной β-формой с пр. гр. $P\bar{3}c1$ и большой ячейкой (z=6) с двойникованием по мероэдрическому закону и разупорядоченной α-формой с пр. гр. $P6_3/mmc$ и малой ячейкой (z=2). Периоды двух ячеек связаны векторными отношениями A = a - b; B = a + 2b; C = c. С увеличением концентрации ЩЗЭ различие между позициями анионов фтора F2 и F3 постепенно утрачивается, сопровождаясь переходом в малую α-ячейку и утратой двойникования с преобразованием элементов двойникования в элементы симметрии. Анализ β↔α перехода требует тщательного анализа дифракционной картины, содержащей слабые сверхструктурные рефлексы в случае β-формы. В работе для 17-ти структур $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ в диапазоне $0 \le y \le 0.15$ проанализирована динамика перехода от пространственной группы *P3c1* к *P6/ммс* в результате изменения количественного и качественного составов, прослежен и продемонстрирован механизм разупорядочения анионной подрешетки на картах разностных синтезов, построенных на заключительных этапах уточнения структур МНК. В изученном *y*-диапазоне выявлена область «кристаллохимической нестабильности» [2] структур $R_{1-y}M_yF_{3-y}$.

[1] Сорокин Н.И., Соболев Б.П.// Кристаллография. 2007. Т. 52. № 5. С. 870.

[2] Бандуркин Г.А., Джуринский Б.Ф., Тананаев И.В.//Особенности кристаллохимии редкоземельных соединений. М. Наука 1984. 230 с.

ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР КРЕМНИЙ-НА–САПФИРЕ ПОСЛЕ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ HE^+ И ОТЖИГА

Чесноков Ю.М.[1], Александров П.А.[1], Белова Н.Е.[1], Шемардов С.Г.[1], Васильев А.Л.[1,2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] «Институт Кристаллографии» РАН
e-mail: chessyura@yandex.ru

Одной из задач микроэлектроники является повышение радиационной стойкости устройств. Повышению радиационной стойкости кремний-на-сапфире (КНС) структур способствует создание центров рекомбинации носителей заряда, в частности создание слоя наноразмерных пор в сапфире с помощью ионной имплантации гелия.

Имплантация ионов гелия энергией 75 кэВ проводилась в стандартные КНС-структуры с толщиной эпитаксиального слоя Si 300 нм. Образцы облучались дозами $(1.5–4)\cdot10^{16}$ $He^+/см^2$, близкими к дозам блистеринга. Последующие отжиги проводились при температурах 800°C и 1000°C. Ионная имплантация приводит к появлению радиационных дефектов в слоях Si и α-Al_2O_3. Последующий отжиг приводит к отсутствию радиационных дефектов в Si, а в α-Al_2O_3 формируются наноразмерные поры. На рис.1а представлено светлопольное ПЭМ изображение поперечного среза полученной КНС-структуры, содержащей 250 нм слой пористого α-Al_2O_3. Поры диаметром менее 10 нм обладают сферической формой, а границы пор более 10 нм плоские и ориентированы вдоль кристаллографических плоскостей α-Al_2O_3, как показано на рис.1б.

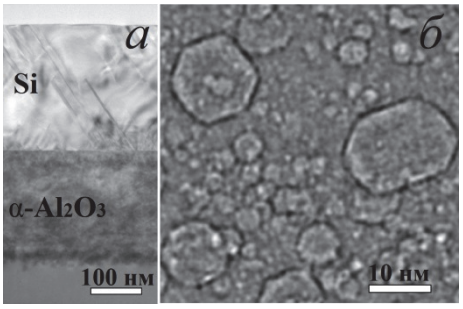


Рис. 1. а) светлопольное ПЭМ изображение поперечного сечения образца после имплантации и отжига; б) светлопольное ПЭМ в режиме дефокусировки (дефокус - 500 нм) пористого слоя α-Al_2O_3.

Для исследования образцов методами электронной микроскопии были приготовлены поперечные сечения полученных структур с помощью фокусированного ионного пучка (ФИП) Ga^+ в электронно-ионном микроскопе HeliosNanoLab™ 600i (FEI, США). Исследование проводилось в просвечивающем растровом электронном микроскопе Titan 80-300 (FEI, США) с ускоряющем напряжением 300 кэВ, с корректором сферической аберрации и энергодисперсионным рентгеновским спектрометром.

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР МОНОКРИСТАЛЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО СИНТЕЗА

Хорьков К.С., Малеев А.В., Чкалов Р.В., Кочуев Д.А., Аракелян С.М., Прокошев В.Г.

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых

e-mail: freeod@mail.ru

Одним из проявлений уникальных свойств углерода является наличие большого количества его кристаллических модификаций, начиная от сверхтвердых форм до различных вариаций графита. В докладе рассматривается метод формирования кристаллических углеродных структур путем прямого лазерного воздействия на поверхность мишени при низких температурах [1]. Фемтосекундное лазерное излучение осуществляет сверхбыстрый нагрев мишени – лазерная энергия локализуется и поглощается веществом; использование жидкого азота, в качестве криогенной жидкости, ускоряет процесс остывания резко нагретого материала мишени и способствует стабилизации кристаллических форм.

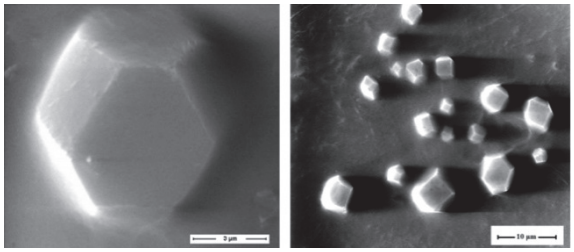


Рис.1. РЭМ-изображения полученных углеродных структур.

Детальное исследование облученной поверхности с помощью сканирующего электронного микроскопа выявило углеродные кристаллические структуры различной формы (рис.1). Зарегистрированные структуры имеют размеры порядка 1÷10 мкм, что затрудняет использование традиционных методов определение их кристаллической структуры. В качестве альтернативного подхода в докладе предлагается методика сопоставления габитуса (внешней формы) полученных образцов с совокупностью многогранников роста, построенной методом послойного роста [2], для известных кристаллических модификаций сверхтвердого углерода [3].

Работа выполнена в рамках государственного задания ВлГУ № 2014/13 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности, а также при поддержке в рамках гранта РФФИ № 14-02-97508.

[1] Khorkov K.S. et al //Physics Procedia, 2016 (в печати).

[2] Малеев А.В., Шутов А.В. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов. Владимир: ВГГУ, 2011, 107 с.

[3] Ivanovskii A. L.//Journal of Superhard Materials, 2013, том 35, №. 1,.с 1-14.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА БОРАТА $Sr_3Bi_2(BO_3)_4$, ДОПИРОВАННОГО Eu^{3+}

Шаблинский А.П.[1], Бубнова Р.С.[1,2], Поволоцкий А.П.[2], Галафутник Л.Г.[1], Филатов С.К.[2],

[1] Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН

[2] СПБГУ, ИНоЗ, каф. кристаллографии

shablinskii.andrey@mail.ru

Новое соединение $Sr_3Bi_2(BO_3)_4$ получено быстрым охлаждением расплава от 1200 °С. Кристаллическая структура решена методом изменения знака заряда и уточнена до *R*-фактора ~ 5%. Структура состоит из трех независимых треугольников BO_3 и трех катионных позиций, каждая позиция заселена атомами Sr и Bi. Данный борат относится к семейству $A_3RE_2(BO_3)_4$ перспективных люминофоров, поэтому соединение $Sr_3Bi_2(BO_3)_4$ было допировано Eu^{3+}. Структура соединения, допированного Eu^{3+}, уточнена до *R*-фактора ~ 5% на основе 1551 независимых рефлексов. Параметры ячейки закономерно уменьшились с $a = 7.5107(5)$, $b = 16.274(1)$, $c = 8.8163(5)$ Å, $V = 1077.6(1)$ Å^3 для чистой фазы до $a = 7.4116(5)$, $b = 16.0596(8)$, $c = 8.7634(4)$ Å, $V = 1043.1(1)$ Å^3 для фазы, допированной Eu^{3+}. Анализ заселенности позиций показывает, что европий входит преимущественно в позиции *M*2 и *M*3. Термическое расширение $Sr_3Bi_2(BO_3)_4$ изучено методом порошковой рентгенографии; коэффициенты термического расширения рассчитаны в программе ThetaToTensor [1] и при комнатной температуре составляют: $\alpha_a = 14(1)$, $\alpha_b = 12(1)$, $\alpha_c = 7(1)$, $\alpha_V = 37(1)\times10^{-6}$ K^{-1}, а при 700 °С: $\alpha_a = 46(1)$, $\alpha_b = 28(1)$, $\alpha_c = -7(2)$, $\alpha_V = 68(2)\times10^{-6}$ K^{-1}. Исследование люминесцентных свойств серии образцов $Sr_3Bi_2(BO_3)_4$:Eu показало, что интегральная интенсивность люминесценции от оптимальной концентрации Eu при замещении Sr сопоставима с аналогичным результатом в алюмоиттриевом гранате и выше, чем в оксиде иттрия.

Работа была выполнена в рамках гранта РФФИ 15-03-05845. Рентгенография выполнена в РЦ СПбГУ «РДМИ».

[1] Бубнова, Фирсова и др. // Физ. и хим. стекла 2013, 39, №3, с. 505–975.

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ ГИДРОЛИЗЕ ДИКАЛЬЦИЙФОСФАТА ДИГИДРАТА В ГИДРОКСИАПАТИТ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ОБРАЗУЮЩЕГОСЯ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОЛИЗА ГИДРОКСИАПАТИТА

Шамрай В.Ф., Карпихин А.Е., Сиротинкин В.П., Федотов А.Ю., Комлев В.С., Баринов С.М.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва

e-mail: shamray@imet.ac.ru

Гидроксиапатит кальция (ГА), благодаря хорошей биосовместимости, успешно применяется в медицине. Особенности кристаллической структуры и микроблочного строения материалов из ГА оказывают заметное влияние на его биофизические свойства. Поставлена задача рентгеновским методом Ритвелда и методами электронной микроскопии исследовать структурные превращения, протекающие при гидролизе дикальцийфосфата дигидрата (ДКФД) в водном растворе ацетата натрия, кристаллическую структуру гидроксиапатита и микроблочное строение порошков, образующихся при гидролизе, в сравнении с ГА, полученными другими методами. Синтез гидроксиапатита в процессе гидролиза осуществляется с участием структурных превращений ДКФД→ОКФ, где ОКФ, октакальциевый фосфат, и ОКФ→ГА. Показано, что эти превращения могут быть реализованы за счет малых смещений катионов Ca^{2+} и анионов PO_4^{3-}. При этом структура ГА и апатитного блока ОКФ рассматривалась как образованная взаимопроникающими гексагональными призмами центрированными колонками CaI. Кристаллическая решетка ГА, полученного гидролизом, заметно искажена; коэффициент искажения основного элемента структуры гидроксиапатита тетраэдрических кластеров по Бауэру (DI(TO) = 0,0154), вместо 0,005, значения соответствующего ГА, полученному осаждением из раствора. Заселенности позиций дефектны по кальцию. В порошках гидроксиапатита, полученных гидролизом, зависимость уширения рентгеновских линий от *hkl* имеет анизотропный характер. Основной вклад в уширение вносят ОКР, или микроблоки размером d ~ 300-400 Å. По своей структуре ГА, полученный гидролизом ДКФД, близок кальций-дефицитному гидроксиапатиту, рассматриваемому, вследствие повышенной растворимости, как перспективный биоматериал.

$Mn_3(PO_4)_2$: КРИСТАЛЛОХИМИЯ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙИ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Шванская Л.В., Волкова О.С.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

e-mail:lshvanskaya@mail.ru

Фосфат марганца $Mn_3(PO_4)_2$ кристаллизуется в трех моноклинных модификациях: α- (тип графтонита) и β' (сверхструктура от β-$Zn_3(PO_4)_2$), полученные методом твердофазной реакции [1-3] и γ-фаза, синтезированная в гидротермальных условиях [4]. Кристаллические структуры всех модификаций состоят из связанных ребрами и вершинами $[MnO_5]$ и $[MnO_6]$ полиэдров (в соотношении 2:1), объединяющимися в каркас посредством $[PO_4]$ тетраэдров и отличаются способом сочленения Mn и P полиэдров. В настоящей работе впервые представлены результаты исследования резонансных и термодинамических свойств полиморфных $Mn_3(PO_4)_2$ фаз, обсуждаются их кристаллохимические особенности, приведены результаты уточнения кристаллической структуры α-$Mn_3(PO_4)_2$ по монокристальным рентгеновским данным. Установлено, что α- и γ –фазы демонстрируют магнитоупорядоченное состояние ниже T_N = 21.9 и 13.3 K, в то время как β'-$Mn_3(PO_4)_2$ претерпевает два перехода при температурах 12.3 и 10.3 K. Природа наблюдаемых упорядочений предположительно имеет сложный неколлинеарный антиферромагнитный характер. Данные ЭПР спектроскопии подтверждают близость g – факторов к значению 2 для всех полиморфных модификаций. Для γ-$Mn_3(PO_4)_2$ наблюдается плато на уровне 1/3 намагниченности насыщения (для полей от 7.5 до 23.5 T), отвечающее системе магнитных моментов ↑↑↓ внутри слабовзаимодействующих тримеров. α- и β'-модификации проявляют переход типа спин-флоп в полях до 30 T.

[1] Yan D., Zhao Y., Dong Y., Liang Z., Lin X.// J. Alloys Compd. 2015, 636, p. 73-80.

[2] Stephens J. S. and Calvo C. // Can. J. Chem. 1969, 47, p. 2215-2225.

[3] Bali B. El., Glaum R., Gerk M., Maass K. Z. // Anorg. Allg. Chem. 2000, 626, p. 2557-2562.

[4] Massa W., Yakubovich O., Dimitrova O. Solid State Sci. 2005, 7, p. 950-956.

СТАБИЛИЗАЦИЯ РОМБИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ $Ca_3B_2SiO_8$ ИОНАМИ Yb И ЕЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

Юхно В.А.[1], Волков С.Н.[1], Бубнова Р.С.[1,2]

[1] *Институт Химии Силикатов РАН*

[2] *Санкт-Петербургский Университет*

e-mail: yukhno.valentina@gmail.com

Боросиликаты семейства $M_3B_2SiO_8$:xREE (M = Ca, Sr) являются новыми перспективными люминофорами [1]. В настоящей работе на основании поли- и монокристальных рентгендифракционных данных при допировании боросиликата $Ca_{3-3x/2}Yb_xB_2SiO_8$ обнаружен фазовый переход моноклинная ↔ ромбическая фаза: при $0 \le x(Yb^{3+}) \le 0.1$ существуют твердые растворы на основе β-$Ca_3B_2SiO_8$, при $0.2 \le x(Yb^{3+}) \le 0.3$ – на основе α-$Ca_3B_2SiO_8$, т.е. ромбический полиморф в стандартных условиях. Аналогичный переход происходит в $Ca_3B_2SiO_8$ с повышением температуры.

Монокристаллы $Ca_3B_2SiO_8$:Yb^{3+} получены кристаллизацией из расплава. Структуры $Ca_{3-3x/2}Yb_xB_2SiO_8$ (x=0.2 и 0.3; R = 0.051 и R = 0.057) определены в ромбической сингонии, *Pnma*: a=11.9627(3), b=3.6279(2), c=5.2066(6) Å, V=225.96(2) Å^3 и a=11.9144(2), b=3.6079(7), c=5.1988(5) Å, V=223.48(3) Å^3, соответственно. Эти фазы структурно подобны полиморфу α-$Ca_3B_2SiO_8$ ($Pna2_1$), структура которого определена при 600 °C [2], он обратимо переходит в моноклинный β-$Ca_3B_2SiO_8$ [3].

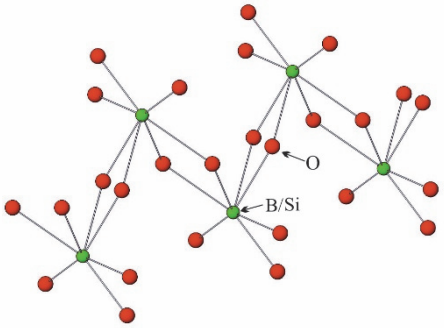


Рис.1. Фрагмент боросиликатной цепочки

Основой структуры семейства являются боросиликатные псевдоцепочки (рис.1), состоящие из связанных по вершинам полиэдров TO_x (T = B, Si; x = 3–4). Атомы B и Si заполняют одну позицию: в случае нахождения в ней Si реализуется тетраэдр SiO_4, в случае B – треугольник BO_3, 3 из 4 позиций атомов кислорода частично заселены. Замещение Ca^{2+}→Yb^{3+}+□ приводит к образованию вакансий и расщеплению M-позиции на две подпозиции. Среднее координационное число M-позиции приблизительно ≈ 6.17, учитывая заселенность позиций кислорода.

[1].Sun J. // J. Electrochem. Soc.. 2012. V. 159, № 4. p. 107—114.

[2] Veron E. et al. // Inorg. chem. 2013. V. 52, №. 8, p. 4250−4258.

[3] Бубнова Р.С. и др.// Физ. и хим. стекла. 2016, т.42. №4, с.483-494.

Секция 2. Методы и техника структурных исследований

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ РЕСУРСНЫХ ЦЕНТРОВ КУРЧАТОВСКОГО КОМПЛЕКСА НБИКС-ТЕХНОЛОГИЙ

Акилин О.В.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: Akilin_OV@nrcki.ru

Ресурсные центры Курчатовского комплекса НБИКС-технологий (РЦ) — это инструментальная составляющая исследовательской инфраструктуры НИЦ «Курчатовский институт», включающая оборудование для проведения широкого спектра исследовательских, измерительных и технологических работ в различных сферах конвергентных наук и технологий. Целями и задачами РЦ являются: обеспечение оперативного и качественного проведения измерений и исследований на научном оборудовании; отработка новых методик измерений с целью расширения возможностей и развития новых направлений научно-исследовательской деятельности; обучение работе и повышение квалификации сотрудников на оборудовании; расширение перечня пользователей инфраструктурой РЦ.

В Курчатовском комплексе НБИКС-технологий организовано отделение ресурсных центров, в состав которого входит восемь ресурсных центров: Зондовой и электронной микроскопии; Молекулярной и клеточной биологии; Нейрокогнитивных исследований; Ядерно-физических методов измерений; Органических и гибридных материалов; Лабораторных рентгеновских методов; Оптической микроскопии и спектроскопии; Электрофизических методов.

В докладе рассмотрены вопросы приборной оснащенности РЦ, сфера технологических возможностей имеющегося оборудования, принципы и алгоритмы использования оборудования РЦ для потенциальных пользователей.

СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Акимова О.В.[1], Велигжанин А.А.[2]

[1] Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: akimova@physics.msu.ru,

Изучение структурного состояния металлов и сплавов с использованием синхротронного рентгеновского излучения (СРИ) значительно расширяет возможности получения информации, что актуально в целях обеспечения безопасности технологических процессов [1].

Исследование твердых растворов на основе палладия (Pd-In-Ru, Pd-Y) обусловлено их уникальными свойствами избирательно сорбционно вбирать и пропускать водород из водородосодержащих газовых смесей [2].

Дифракционные картины (рис.1) получены на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского источника синхротронного излучения в геометрии на пропускание (λ=0.619918 Å) с использованием детектора MarCCD165.

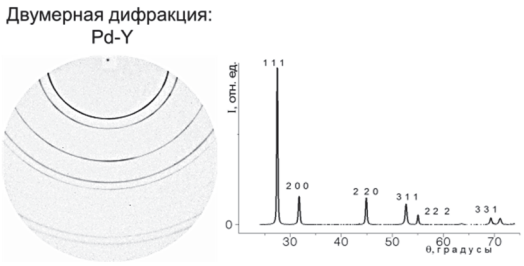


Рис.1. Дифракционная картина, полученная на СРИ для фольги сплава Pd-Y и преобразованная к виду I (θ),θ-угол дифракции, I-интенсивность рассеянного излучения.

Образцы представляли собой фольги толщиной 50 мкм (Pd-In-Ru) и 100 мкм (Pd-Y). В системе Pd-In-Ru были исследованы исходная фольга и образец, подвергнутый электролитическому гидрированию (ЭГ) и последующей длительной релаксации на воздухе при комнатной температуре [3], с целью выявления характерных черт эволюции открытой системы после деформационного воздействия (гидрогенизации). Результатом исследований стал комплексный анализ структурного состояния фольг сплавов на основе палладия и установление эволюционирования дефектной структуры твердого раствора Pd-In-Ru после гидрогенизации в течении длительного промежутка времени.

Велигжанин А.А. благодарит Совет по грантам Президента Российской Федерации за предоставление стипендии в 2016 году.

[1] Козлов С.И., Фатеев В.Н Водородная энергетика: совре-менное состояние, проблемы, перспективы. М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2009. 518 с.

[2] Бурханов Г.С., Н.Б. Горина и др.// Рос. Хим. Журнал, 2006, том L, №4. с.36-40.

[3] Авдюхина В.М., Акимова О.В. и др.// Вестник Московского университета. Физика. Астрономия, 2011, № 1. с. 33-38.

ЯДЕРНО-РЕЗОНАНСНАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ МАГНИТНЫХ МУЛЬТИСЛОЕВ

Андреева М.А.
МГУ им. Ломоносова
e-mail: Mandreeva1@yandex.ru

Структурные исследования в 21 веке сосредоточены на определении не столько геометрического расположения атомов, сколько на их физических характеристиках с разрешением по атомным слоям. Именно такие исследования для многослойных пленок проводятся методом ядерно-резонансной рефлектометрии (ЯРР) [1-3]. Метод чувствителен к магнитным и электрическим характеристикам атомов резонансных изотопов и обладает разрешением по глубине < 1 нм. Важной особенностью ЯРР является возможность измерять не только резонансные рефлектометрические кривые, но и мессбауэровские спектры отражения для разных углов скольжения (рис.1). На синхротронном излучении спектры обычно измеряются на временной шкале распада возбужденных уровней ядер. Примером таких исследований является эксперимент проведенный на Spring-8, давший картину реориентации магнитных моментов (через неколлинеарные скрученные состояния) в антиферромагнитно-упорядоченной структуре $[^{57}Fe(3.0\ nm)/Cr(1.2\ nm)]_{10}$ под действием приложенного внешнего поля [3].

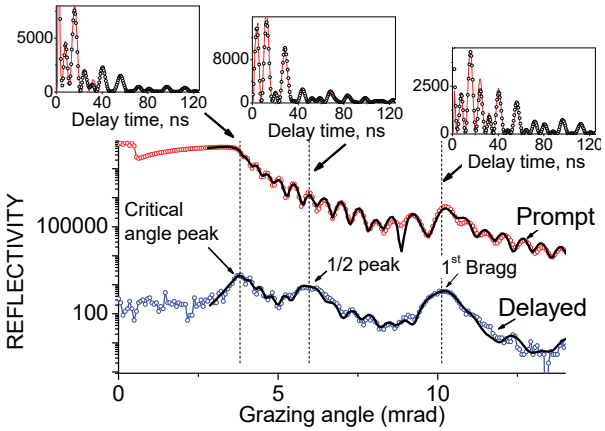


Рис. 1. Кривые рентгеновской (верхняя кривая) и ядерно-резонансной (нижняя кривая) рефлектометрии, измеренные до приложения внешнего поля. На вставках временные спектры ЯРР, измеренные для выделенных максимумов. Такие же данные были получены при каждом новом значении последовательно увеличивающегося внешнего поля (0 – 1500 Тл), приложенном вдоль и поперек пучка СИ. Обработка проводилась по нашей программе REFTIM [4,5].

[1] Röhlsberger R. // Hyperfine Interactions, 1999, v. 123/124, p. 455–479.

[2] Андреева М.А., Ядерно-резонансные исследования на синхротронном излучении («Мессбауэровская» спектроскопия на синхротронах), 172 с., LAMBERT Acad. Publ., 2013.

[3] Andreeva M., Gupta A., et al. // Phys. Rev. B, 2015, v. 92, p. 134403-1-12.

[4] http://www.esrf.eu/computing/scientific/REFTIM/MAIN.htm

[5] M.A. Andreeva // Hyperfine Interactions, 2008, том 185, с. 17-21.

РЕНТГЕНОВСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕ ПОЛНОСТЬЮ УПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ: РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ, МИКРОТОМОГРАФИЯ, МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ

Асадчиков В.Е.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: asad@crys.ras.ru

Рентгеновская рефлектомерия – метод исследования слоистых систем с достаточно гладкими границами раздела. В основе его лежит явление полного внешнего отражения. В этих условиях отражение и рассеяние излучения дают информацию о шероховатости поверхности и структуре приповерхностных слоев. Показано, что для ряда подложечных материалов удается добиться шероховатости на уровне одного ангстрема. Кроме того, данный метод позволяет выявить и охарактеризовать регулярные моноатомные ступени, создаваемые при некоторых видах обработки на поверхностях монокристаллов. Рассмотрены возможности рентгеновской рефлектометрии как для характеризации многослойных систем (в диапазоне толщин слоев от долей до нескольких десятков нанометров), применяемых в микроэлектронике, так и для анализа слоев на поверхности жидкостей, которые могут рассматриваться как модели биологических мембран.

Описаны принципы рентгеновской абсорбционной микротомографии. Показана продуктивность использования рентгеновской микротомографии в биологических и медицинских исследованиях, а также в промышленных применениях. Метод топотомографии позволяет установить пространственное расположение и тип дефектов в кристаллах. Показано, что на лабораторных микротомографах удается достичь микронного разрешения.

При исследовании строения белковых молекул и их комплексов, вирусные частицы, структуры полимеров и дргихда приложений данное разрешение не является достаточным. В докладе представлены некоторые примеры таких исследований, основанные на применении рентгеновского малоуглового рассеяния.

Работа выполняется при поддержке Минобрнауки, соглашение № 14.616.21.0005 (проект RFMEFI61614X0005).

СОПОСТАВЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ, РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ СПИНТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

Асадчиков В.Е.[1], Васильев А.Л.[2], Дугаев В.К.[4], Муслимов А.Э.[1], Нуждин А.Д.[1], Рощин Б.С. [1], Слободский Т.[3], Топали Р.[3], Волков Ю.О.[1], Вольски С.[4], Жигалина О.М. [1], Хансен В.[3], Хмеленин Д.А.[1], Каратеев И.А.[2]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Институт прикладной физики и Центр исследования микроструктур Гамбургского университета

[4] Физический факультет Ржежовского Технологического Университета

e-mail:170993@list.ru

Развитие современной электроники за счет увеличения количества элементов и уменьшения их размеров исчерпывает себя, и одним из перспективных путей развития является спинтроника. Электрические характеристики спинтронных транзисторов сильно зависят от качества осажденных слоев и границ раздела. В целях оптимизации технологии получения планарных наноструктур Au/Fe/MgO/GaAs, служащих основой для создания спинтронных транзисторов [1], проведено их комплексное исследование.

Рентгеновская рефлектометрия (XRR) [2] позволила получить статистическую информацию о распределении нанесенных слоев в латеральном направлении по большой площади. Для получения локальной информации использовались просвечивающая электронная микроскопия (HRTEM) и энергодисперсная рентгеновская спектроскопия (EDX). Как можно видеть статистическое распределение реальной части диэлектрической проницаемости по глубине хорошо совпадает с локальными сканами HRTEM и EDX (Рис. 1). Результаты не только сходятся, но и дополняют друг друга. Полученная информация о структуре использована для отработки отдельных стадий осаждения и отжига последующих партий образцов.

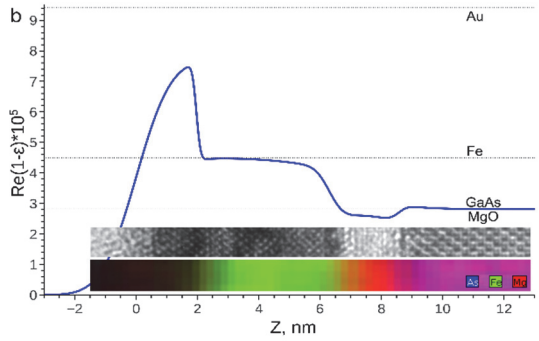


Рис. 1. Сопоставление результатов исследований наноструктур Au/Fe/MgO/GaAs методами XRR, HRTEM и EDX.

[1] http://iap.physnet.uni hamburg.de/group_w/?n=SpinBarrier.HomePage.

[2] Kozhevnikov, I.V., NIM A 508, 519 (2003).

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ ПРИ ОТРАЖЕНИИ ОТ ПОВЕРХНОСТИ НАНО СТРУКТУРИРОВАННЫХ ОБЪЕКТОВ

Белушкин А.В.[1], Маношин С.А.[1], Рихвицкий С.В.[2]

[1] Лаборатория нейтронной физики им. И.М.Франка, ОИЯИ

[2] Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ

В работе проведено моделирование картины дифракции при отражении нейтронного пучка от регулярно упорядоченных нано структурированных объектов на поверхности и в объеме однородной матрицы. Во всех рассматриваемых примерах в качестве матрицы использовался кремний, а в качестве объектов, на которых происходит дифракция золото или натуральный никель. Выбор этих материалов обусловлен значительной разницей в плотности длины рассеяния нейтронов матрицы и рассеивающих центров, что позволило получить высококонтрастные дифракционные пики высокой интенсивности. Показано, что использованное при моделировании кинематическое приближение, учитывающее эффект преломления нейтронной волны на границе раздела сред, дает неплохое согласие с известными экспериментальными данными. Кроме того, продемонстрировано, что, в отличие от обычной дифракции, в рассматриваемых моделях могут возникать необычные систематические погасания дифракционных пиков, связанные с конечными геометрическими размерами рассеивающих нейтроны объектов и геометрией эксперимента.

МЕТОД КЛАССИФИКАЦИИ ДИФРАКЦИОННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ДИФРАКЦИОННОЙ КОГЕРЕНТНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОСКОПИИ

Бобков С.А.[1], Теслюк А.Б.[1], Горобцов О.Ю.[1,2], Ефанов О.М.[2], Курта Р.П.[3] , Ильин В.А.[1,4], Сенин Р.А.[1], Вартаньянц И.А.[2,5]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Немецкий электронный синхротрон ДЕЗИ

[3] Научный центр лазеров на свободных электронах, Германия

[4] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

[5] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

E-mail: s.bobkov@grid.kiae.ru

Новый подход когерентной рентгеновской дифракционной микроскопии (CXDI) изучает структуру биологических частиц через измерение непрерывной дифракционной картины и позволяет увеличить разрешение биологических частиц в субнанометровом диапазоне.

Идентичные образцы исследуемой частицы в случайной ориентации вводятся в луч падающего излучения. На основе полученного набора дифракционных изображений можно восстановить структуру изучаемой частицы. Для реконструкции структуры с разрешением в несколько ангстрем требуется порядка 100000 дифракционных изображений. Сегодня в экспериментах менее 1% получаемых изображений подходят для восстановления структуры. Большинство изображений пустые, а большая часть оставшихся изображений содержит дифракционный вклад от капель воды, нескольких образцов или некоторой примеси.

В данной работе представлена методика классификации дифракционных изображений, получаемых в экспериментах по когерентной рентгеновской дифракционной микроскопии на лазерах на свободных электронах, таких как XFEL. Разработан новый метод определения характеристических признаков, который позволяет классифицировать данные в соответствии со структурой исходных частиц. Классификация проводится с использованием метода главных компонент (PCA) и метода опорных векторов (SVM). Рассмотрены результаты применения методики классификации к данным моделирования и экспериментальным данным.

[1] S. A. Bobkov et al. // J. Synchrotron Rad., 2015, № 22, с 1345–1352.

НЕЙТРОННАЯ СТРЕСС-ДИФРАКТОМЕТРИЯ ПО ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

Бокучава Г.Д., Папушкин И.В.

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

e-mail: gizo@nf.jinr.ru

За последнее десятилетие дифракция тепловых нейтронов стала мощным инструментом для решения актуальных задач физического материаловедения. Поскольку среди всех видов излучения нейтроны обеспечивают наибольшую глубину проникновения в материал (до 2-3 см для стали), то этот метод стал весьма популярным при решении различных материаловедческих задач во многих зарубежных исследовательских центрах, где были созданы специализированные нейтронные стресс-дифрактометры. В России же установки подобного типа практически отсутствуют, хотя имеется реальная необходимость в освоении и внедрении неразрушающего дифракционного метода контроля внутренних напряжений в новых перспективных материалах и промышленных изделиях.

Первые эксперименты с использованием дифракции нейтронов по методу времени пролета для решения задач физического материаловедения начались в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ в середине 1990-х гг. Для этого было разработано и создано необходимое оборудование, проведены тестовые измерения с целью апробирования новой уникальной методики исследования остаточных напряжений с использованием нейтронной корреляционной фурье-дифрактометрии по времени пролета на источнике нейтронов с длинным импульсом. Успешная реализация данного метода на реакторе ИБР-2 и накопленный опыт работы стимулировали создание специализированного фурье-стресс-дифрактометра ФСД, предназначенного для исследования внутренних напряжений в объемных промышленных изделиях и новых перспективных материалах [1].

Специальная корреляционная методика – использование быстрого фурье-прерывателя для модуляции интенсивности первичного нейтронного пучка и RTOF-метода для накопления данных – позволяет получать дифракционные спектры с необходимым высоким разрешением ($\Delta d/d \approx 2 \cdot 10^{-3}$ при угле рассеяния $2\theta=140°$ и $\Delta d/d \approx 4 \cdot 10^{-3}$ при угле рассеяния $2\theta=90°$) в широком диапазоне межплоскостных расстояний при сравнительно коротком пролетном расстоянии от прерывателя до места образца (L = 5.5 м) [2]. С 2014 г. система накопления данных ФСД функционирует в списочном режиме (“List-mode”), что позволяет существенно расширить доступный диапазон и гибко формировать параметры шкалы по времени пролета, а также вводить необходимые поправки и осуществлять фильтрацию событий без проведения повторных измерений.

Отличительной особенностью дифрактометра ФСД являются два детектора при углах рассеяния ±90° с большими телесными углами (~0.1 стерадиан каждый) и высокой разрешающей способностью. Система новых широкоапертурных радиальных коллиматоров обеспечивает выделение в образце минимального рассеивающего объёма 2×2×2 мм3, в котором измеряется

деформация кристаллической решетки материала при сканировании образца. Для изучения поведения конструкционных материалов при внешней одноосной нагрузке in situ в нейтронном пучке используется нагрузочная машина (Fmax = 20 кН), которая позволяет проводить измерения при температурах от комнатной до 800 °С. Кроме того, в составе экспериментального оборудования имеются прецизионный гониометр Huber с грузоподъемностью до 300 кг, высокотемпературная зеркальная печь до 1000 °С, автоматизированные диафрагмы и т.д.

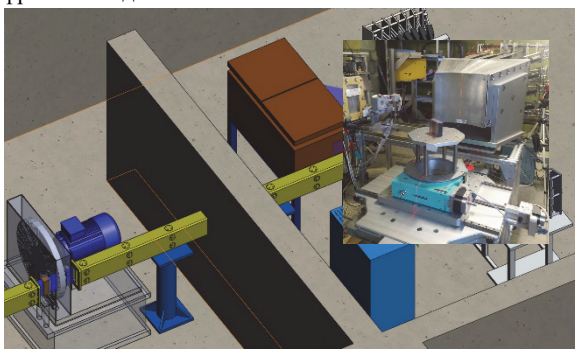


Рис.1. 3D модель фурье-дифрактометра ФСД на реакторе ИБР-2. На вставке показана фотография места образца (видны: диафрагма на падающем пучке, радиальный коллиматор, гониометр Huber с исследуемым образцом).

Результаты регулярных экспериментов по изучению остаточных напряжений в промышленных изделиях и новых перспективных материалах показали, что дифрактометр ФСД является уникальным инструментом, а его основные характеристики – светосила, разрешающая способность, устройства формирования падающего и рассеянного пучков – находятся на лучшем мировом уровне [3]. В работе дано описание текущего состояния дифрактометра ФСД и его основных параметров, а также приведены примеры выполненных экспериментов.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 15-08-06418_а и № 14-42-03585_р_центр_а).

[1] G.D. Bokuchava, V.L. Aksenov et al. // Appl. Phys. A: Mater. Sci. & Proc., 2002, Vol. 74 [Suppl1], pp. s86-s88.

[2] Г.Д. Бокучава, А.М. Балагуров и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед., 2010, № 11, с. 9-21.

[3] G.D. Bokuchava, I.V. Papushkin et al. // Romanian Journal of Physics, 2016, Vol. 61, No. 3-4, pp. 491-505.

ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ ПИРОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОКОПИИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Боргардт Н.И.[1], Приходько А.С.[1], Зайбт М.[2]

[1] Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

[2] 4-й Физический институт Геттингенского университета

e-mail: lemi@miee.ru

Уникальные свойства пироуглеродных материалов, в том числе пироуглерода и углеситалла связаны с особенностями их турбостратной структуры, образованной базисными плоскостями, которые формируются двумерно упорядоченными углеродными сетками. Несмотря на успешность практического применения этих материалов закономерности их сложного атомарного строения требуют дальнейшего исследования с применением современных методов высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ).

Для изучения атомарной структуры пироуглерода и углеситала получены дефокусные серии из 10 ВРЭМ-микрофотографий, на основе которых восстановлены фазы волновой функции (ВФ) электрона на выходной поверхности образца. Экспериментальные исследования выполнялись на микроскопах Philips CM-200-UT-FEG и FEI Titan Themis 200 при ускоряющих напряжениях 200 и 80 кВ.

Используя двумерное распределение фазы ВФ и моделирование атомных расположений методом молекулярной динамики (МД), показано, что атомарная структура пироуглеродных материалов может быть адекватно описана в рамках ленточной модели, представляющей их в виде совокупности непрерывных изгибающихся базисных углеродных плоскостей. Основанные на этой модели расчеты атомных расположений методом МД и последующие вычисления распределений фазы ВФ для тестовых структур позволили установить, что наблюдаемое в эксперименте увеличение средних межплоскостных расстояний ($< d >$) в пироуглеродных материалах может быть связано с обеднением базисных плоскостей атомами углерода. В частности, если в графите оно равно $< d > = 0,335$ нм, то при 3% обеднении оно возрастает до 0,343 нм, а при 5% обеднении – до 0,351 нм.

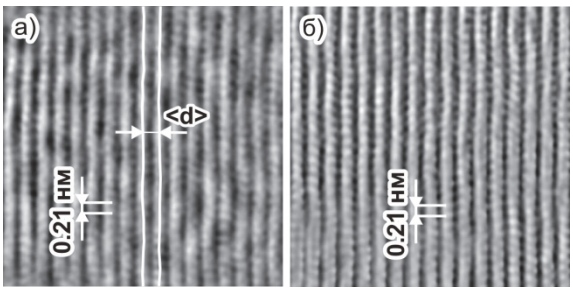


Рис.1. Экспериментальное (а) и расчетное(б) распределения фаз ВФ для углеситалла.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «ФАЗА» НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Борисов М.М., Ковальчук М.В., Мухамеджанов Э.Х.
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
e-mail: borisov.kcsr@gmail.com

На Курчатовском источнике синхротронного излучения (КИСИ) в конце 2014 года была введена в эксплуатацию экспериментальная станция фазочувствительных методов исследования вещества «Фаза», расположенная на канале 2.3 вывода излучения из поворотного магнита большого накопительного кольца. Станция «Фаза» представляет собой пилотный проект станций нового поколения, активно сооружаемых на КИСИ. Основные направления исследований на станции включают нанодиагностику неорганических и биоорганических тонкопленочных структур с применением техники стоячих рентгеновских волн, в том числе для биомедицинских приложений, исследование дефектообразования и эволюции дефектов в современных материалах методом диффузного рассеяния СИ, исследование магнитных наноструктур методами резонансной рефлектометрии и стоячих рентгеновских волн, изучение структурных особенностей кристаллов методом резонансной дифракции, определение низких концентраций элементов, методом рентгеновской флуоресценции в условиях полного внешнего отражения СИ и др.

Оптическая схема станции представлена на рисунке 1. Оборудование станции размещается в двух защитных домиках - «хатчах», которые обеспечивают радиационно безопасные условия работы в экспериментальном зале. Управление аппаратурой полностью автоматизировано.

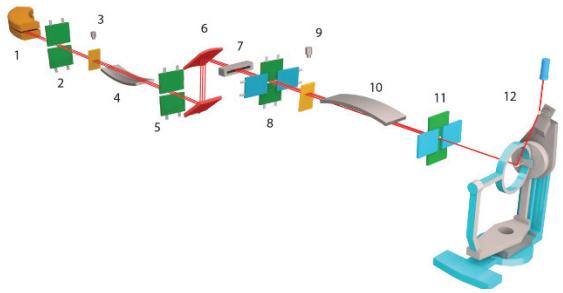


Рис.1. Рентгенооптическая схема станции «Фаза»: 1-источник СИ; 2-входные щели;3-монитор положения пучка; 4-вертикальное коллимирующее зеркало; 5-первичные щели; 6-двухкристальный монохроматор с сагиттальным изгибом второго кристалла; 7-ионизационная камера; 8-вторичные щели; 9-монитор положения монохроматического пучка; 10-вертикальное фокусирующее зеркало; 11-щели образца; 12-гониометр.

Описание функциональных возможностей станции сопровождается примерами экспериментальных исследований.

ЛАБОРАТОРНЫЕ МИКРОТОМОГРАФЫ. КОНСТРУКЦИЯ И АЛГОРИТМЫ РЕКОНСТРУКЦИИ

Бузмаков А.В.[1], Асадчиков В.Е.[1], Золотов Д.А.[1], Рощин Б.С.[1], Дымшиц Ю.М.[1], Шишков В.А.[1], Чукалина М.В.[1], Ингачева А.С.[1,2], Ичалова Д.Е.[1,3]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИУ «Высшая школа экономики»
[3] Московский физико-технический институт
e-mail: buzmakov@gmail.com

В Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН ведутся исследования внутренней структуры объектов различной структуры, как кристаллических, так и нет. Одним из методов неразрушающего исследования применяется рентгеновская микротомография. На разработанных в Институте прототипах микротомографов можно, методом трансимссионной томографии, исследовать объекты размером от 1 мм до 10 см, с разрешением от 1 мкм до 100 мкм соответственно. Для достижения микронного разрешения используется преломляющая и диффракционная рентгеновская оптика. Кроме того, нами разработан лабораторный мкротомограф-дифрактомер позволяющий исследовать трехмерную структуру дефектов в кристаллах методом рентгеновской топо-томграфии.

Для обработки данных томографических исследований создан комплекс программного обеспечения для обработки данных томографических экспериментов реализующий модифицированный автором алгебраический метод томографичесой ректонструкции. Показано, что для исследования структуры биологических объектов с полем зрения на уровне ~1 см и разрешением 10 мкм наиболее эффективно использовать рентгеновское излучение с длиной волны порядка 0,1 нм.

В настоящее время ведутся работы, направленные на увеличение поля зрения и диапазона длин волн применяемого излучения, что позволит создать возможности для изучения неорганических материалов при сохранении поля зрения и разрешения.

Работа выполняется при поддержке Минобрнауки, соглашение № 14.616.21.0005 (проект RFMEFI61614X0005).

НОВЫЕ МЕТОДЫ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ СВЕРХТВЕРДЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ

Васильев А.Л.[1,2], Пресняков М.Ю.[1], Иванова А.Г.[2], Колобылина Н.Н.[1], Ковальчук М.В.[1,2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт кристаллографии РАН
e-mail: a.vasiliev56@gmail.com

Алюминиевые славы Al-РМ-ПМ, где РМ и ПМ - редкоземельный и переходный металлы, известны способностью к формированию металлических стекол и наноразмерных композитов в широком диапазоне состава [1,2]. Эти сплавы обладают высокой твердостью и все больше используются в аэрокосмической индустрии для изготовления узлов корпуса и частей двигателя летательных аппаратов.

Новые методы просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ), энергодисперсионного рентгеновского микроанализа атомного разрешения (ЭРМ) позволяют полнее изучить кристаллическую структуру подобных сплавов. Так была определена кристаллическая структура обнаруженного впервые четырехкомпонентного интерметаллида Al8Fe2-xNixLa (со значениями x =0,8 - 0,9), изоструктурного ромбической фазе Al8Fe2Eu. Параметры элементарной ячейки были уточнены рентгенодифракционными методами. В этом соединение выявлено несколько типов дефектов (один из них представлен на рис. 1), структура которых также была установлена методами электронной микроскопии. Подобные исследования в многофазных поликристаллических материалах с размером зерен в диапазоне 10- 100 нм, возможно проводить только комплементарно - электронно-микроскопическими и рентгеновскими методами, которые в конечном итоге, дают возможность полностью охарактеризовать структуру новых фаз с высокой точностью.

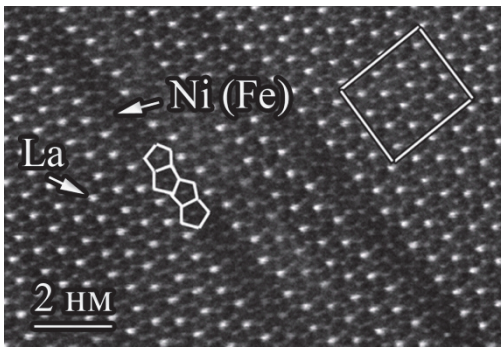


Рис.1.Темнопольное с атомным разрешением ПРЭМ изображение кристаллической структуры интерметаллида Al8Fe2-xNixLa. Прямоугольником обозначена проекция элементарной ячейки, а пентагоны в области дефекта – атомные колонки Ni (Fe).

[1] Inoue A, Ohtera K, Tsai AP, Masumoto T. Jap J Appl Phys 1988;27:L280.

[2] He Y, Poons J, and Shiflet GJ. Science 1988;241:1640

ПРОБЛЕМЫ УСТОЙЧИВОСТИ И ОДНОЗНАЧНОСТИ АНАЛИЗА ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ОТ МОНО- И ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Волков В.В., Конарев П.В., Крюкова А.Е.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: volkicras@mail.ru

Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения и нейтронов широко используется для исследования надатомной структуры вещества при разрешении от долей нанометра до сотен нанометров. Особенно важным является тот факт, что с помощью малоуглового рассеяния можно изучать образцы в их естественном состоянии, без какой-либо специальной подготовки: жидкости, гели, полимерные системы, дисперсные порошки, биомолекулы в растворе и т.п.

Для полидисперсных систем наночастиц (в общем случае - неоднородностей) наиболее часто по данным рассеяния рассчитывают распределения по размерам при априори заданной форме (сферы, цилиндры, эллипсоиды и т.д.). Рассматриваются два основных взаимодополняющих подхода - поиск гладкой функции распределения методом регуляризации и моделирование суперпозицией аналитических функций распределения.

Обратные задачи поиска структурных параметров по данным рассеяния математически плохо обусловлены, что требует как разработки устойчивых алгоритмов поиска решения, так и приобретения практического опыта. В докладе рассматриваются практические и теоретические аспекты интерпретации данных.

В частности, рассматривается алгоритм поиска распределений частиц по размерам, который основан на поиске распределения в виде модельной суммы парциальных распределений компонентов, представляющих собой системы наночастиц, функции распределения которых описываются распределением Шульца, с учетом межчастичной интерференции. На примере экспериментальных данных рассеяния от образцов полимерных и металлсодержащих наночастиц демонстрируются особенности обработки данных рассеяния.

Рассматриваются особенности работы алгоритмов поиска формы частиц в монодисперсных системах, требования к экспериментальным данным, способы анализа неоднозначности и неустойчивости решений.

ОПЫТ ЭКСПЛУАТАЦИИ СТАНЦИИ ДИКСИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ СТРУКТУРЫ СЛАБОУПОРЯДОЧЕННЫХ ОБЪЕКТОВ

Грузинов А.Ю.[1], Петерс Г.С.[1], Старосельский И.А.[1], Забелин А.В.[1], Корнеев В.Н.[2], Ланина Н.Ф.[3], Вазина А.А.[3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

[3] Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия

e-mail: angruzinov@gmail.com

Станция ДИКСИ синхротронного источника НИЦ «Курчатовский институт» предназначена для исследования структуры биологических объектов в статике и динамике методами дифракции и рассеяния в области малых и больших углов SAXS/WAXS на монохроматическом рентгеновском излучении. Основные исследования направлены на определение структуры и структурной динамики различных типов тканей животных и человека и слабоупорядоченных объектов «soft matter».

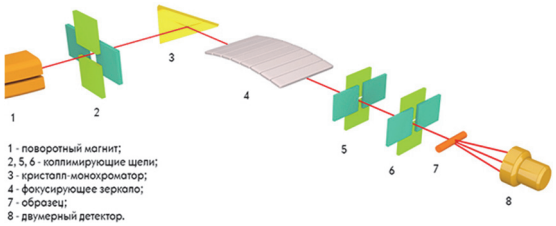


Рис 1. Оптическая схема станции ДИКСИ.

Реализуемая методика является одним из наиболее развитых инструментов для определения структуры с ближним порядком и характерными размерами неоднородностей в диапазоне 1-100 нм. Этот метод успешно применяется для определения структуры широкого класса образцов синтетического происхождения: био- и синтетические полимеры, фибриллярные структуры, наноструктуры на основе липидных бислоев, включения нанометрового размера. В докладе будет представлен обзор станции и некоторых результатов, полученных на станции за последние несколько лет [1-3].

[1] Kovalchuk M. V et al. Investigation of the Initial Crystallization Stage in Lysozyme Solutions by Small-Angle X-ray Scattering // Cryst. Growth Des. 2016. Vol. 16, № 4. P. 1792–1797.

[2] Велигжанин А.А. et al. Исследование перламутрового слоя раковины наутилуса методом рентгеновской дифракции и малоуглового рассеяния на синхротронном источнике // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. Vol. 2016, № 2. P. 47–54.

[3]. Korneev V.N. et al. X-ray stations based on cylindrical zoom lenses for nanostructural investigations using synchrotron radiation // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2012. Vol. 6, № 5. P. 849–864.

РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕКСАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Залужный И.А.[1,2], Курта Р.П.[3], Зозуля А.В.[2], Менушенков А.П.[1], Шпрунг М.[2], Островский Б.И.[4], Вартаньянц И.А.[1,2]

[1] НИЯУ «МИФИ»

[2] Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY

[3] European XFEL GmbH

[4] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: ivan.zaluzhnyy@gmail.com

Гексатическая фаза – промежуточное состояние вещества, образующееся в процессе плавления двумерных кристаллов. Свойства гексатиков определяются сочетанием дальнего ориентационного порядка с ближним порядком. В работе исследовались структура гексатической фазы в плёнках жидких кристаллов (ЖК). Рентгеновские эксперименты были проведены на станции когерентного рассеяния P10 синхротрона PETRAIII (Гамбург, DESY).

Рентгеновские двумерные картины дифракции были получены в геометрии на прохождение, в которой падающий пучок перпендикулярен молекулярным слоям в ЖК плёнке (Рис. 1(a)). С помощью рентгеновского кросс-корреляционного анализа были определены температурные зависимости ориентационных параметров порядка вблизи фазового перехода смектик-гексатик в трех различных ЖК веществах [1, 2]. Подтверждена применимость теории мультикритического скэйлинга к соотношению величин ориентационных параметров порядка, отвечающих различным гармоникам в гексатической фазе [2]. Получены температурные зависимости позиционной корреляционной длины [2]. Предложен метод восстановления двумерной парной функции распределения из данных по рентгеновскому рассеянию в пленках ЖК. На основе этого метода определена двумерная парная функция распределения [3], отражающая структуру одного молекулярного слоя (Рис. 1(b)).

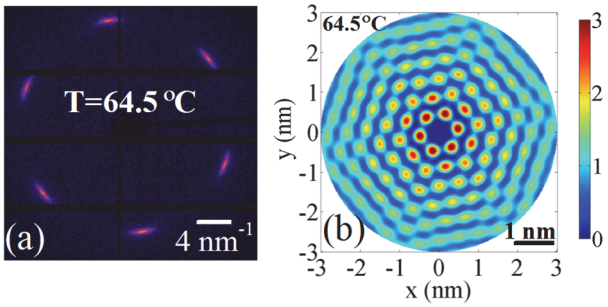


Рис.1. (а) Двумерная картина дифракции в пленке ЖК гексатика (образец 3(10)ОВС); видна картина рассеяния, отвечающая гексагональной симметрии. (б) Соответствующая двумерная парная функция распределения.

[1] R. Kurta et al. // Phys. Rev. E 88, 044501 (2013).

[2] I. Zaluzhnyy et al. // Phys. Rev. E 91, 042506 (2015).

[3] I. Zaluzhnyy et al. // arXiv:1605.06542 (2016)

ПРИМЕНЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ТОМОГРАФИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРЕХМЕРНОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Золотов Д.А.[1], Бузмаков А.В.[1], Елфимов Д.А.[1,2], Чуховский Ф.Н.[1], Асадчиков В.Е.[1,2]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: zolotovden@crys.ras.ru

Управляемое формирование структуры дислокаций в кристаллических материалах позволяет расширить их промышленное применение, например, при создании новых рентгеновских детекторов. С другой стороны, хорошо известно, что различные внешние нагрузки приводят к движению дислокаций, которые изменяют свойства кристаллов. В данной работе представлены результаты исследования искажений кристаллической решетки кремния при введении отдельных дислокаций. Для получения 3D структуры отдельных дефектов используется метод топо-томографии [1, 2]. Впервые с помощью лабораторной рентгеновской установки в Институте кристаллографии ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН на примере кристаллов кремния выявлено пространственное расположение дислокационной полупетли. Показано, что глубина залегания линейного участка не превышает 150 мкм, а его длина ~ 700 мкм. Проведен анализ экспериментально полученного дислокационного топографического контраста на основе численного моделирования 2D- и 3D-изображений [3]. Установлено, что дислокационная полупетля расположена в плоскости скольжения типа {111}. Результаты реконструкции топо-томографических изображений обсуждаются в терминах упругого поля смещений вокруг дислокаций.

[1] Ludwig W., Cloetens P., Härtwig J. et al. // J. Appl. Cryst., 2001, V. 34, 2001, p. 602-607.

[2] Золотов Д.А., Бузмаков А.В., Асадчиков В.Е. и др. // Кристаллография, 2011, Т. 56, № 3, с. 426–430.

[3] Золотов Д.А., Бузмаков А.В., Елфимов Д.А. и др. // Кристаллография, 2016 (в печати).

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЗЕРЕН В КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ СУБСТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ

Исаенкова М.Г., Перлович Ю.А.

Национальный Исследовательский Ядерный Университет "МИФИ"

e-mail: isamarg@mail.ru

Процессы формирования текстуры и субструктуры в металлических материалах при деформационной обработке тесно взаимосвязаны и требуют совместного экспериментального изучения, осуществимого с помощью рентгеновского метода Обобщенных Прямых Полюсных Фигур (ОППФ). Последний совмещает измерение текстуры с анализом профиля рентгеновской линии и дает систематические данные о субструктурной неоднородности материала. Профиль рентгеновской линии (hkl) характеризует состояние кристаллической решетки в облучаемых зернах вдоль нормали к отражающим плоскостям {hkl}. Интенсивность линии I_{hkl} определяется ориентацией отражающих зерен, физическая полуширина β_{hkl} характеризует искаженность кристаллической решетки и фрагментацию зерен на блоки когерентного рассеяния, а угловое положение линии $2\theta_{hkl}$ зависит от упругой остаточной микродеформации зерен. Комбинации этих дифракционных параметров характеризуют субструктурное состояние материала вдоль разных направлений. Ориентация зерен по отношению к текстурным максимумам и минимумам является наиболее эффективным критерием систематизации субструктурных неоднородностей. Остаточные деформационные эффекты, то есть фрагментация зерен и искаженность их решетки, минимальны вдоль направлений, соответствующих текстурным максимумам, и увеличиваются до самого высокого уровня при переходе к текстурным минимумам. В этой связи процессы рекристаллизации и фазовых превращений при отжиге активнее всего происходят в зернах с максимальной запасенной энергией, что обеспечивает размытие текстуры деформации и/или существенную переориентацию зерен в результате отжига текстурованного материала.

ВРЕМЯ-РАЗРЕШАЮЩАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ: ДЛЯ ХИМИИ, БИОЛОГИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Ищенко А.А.[1], Баграташвили В.Н [2], Авилов А.С.[2], Рябов Е.А.[3]
[1] Московский технологический университет, Институт тонкой химической технологии
[2] Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" РАН
[3] Институт спектроскопии РАН
aischenko@yasenevo.ru

С 80-х годов, научный мир предпринял интенсивные усилия для того, чтобы зарегистрировать фильм во времени о когерентной динамике ядер в молекулах, быстрых динамических процессах в биологических тканях и клетках, а также о динамике структуры нано- объемов твердого тела. Наблюдаемые когерентные изменения в ядерной подсистеме методом дифракции электронов с временным разрешением определяют фундаментальный переход от стандартной кинетики к динамике фазовой траектории молекулы и томографии молекулярного квантового состояния. Исследования в связанном 4D пространственно-временного континууме необходимы для понимания динамических особенностей молекулярных систем со сложным профилем поверхности потенциальной энергии. Введение временной развертки в дифракционные методы и разработка принципов изучения когерентных процессов выявили новую парадигму для дифракционных методов и открыли способ анализа динамики волнового пакета, промежуточных продуктов и переходного состояния реакционного центра в газообразных и конденсированных средах. Одним из наиболее перспективных применений разработанных методов дифракции является определение и визуализация процессов, происходящих при фотовозбуждении свободных молекул и биологических объектов и анализ поверхности и тонких пленок. Весь набор спектральных и дифракционных методов, основанных на различных физических принципах, которые дополняют друг друга и позволяют выполнять фотовозбуждение ядер и электронов и проводить диагностику их динамики во время сверхкоротких временных промежутков, открывают новые возможности для проведения исследований с необходимой интеграцией триады «структура-динамика-функция» в области химии, биологии и материаловедения. Включены и процитированы результаты нескольких известных международных исследовательских групп. Результаты исследований поддержаны грантами РФФИ № 16-29-11679 офи_м и № 15-59-32401 РТ-оми.

ЛАЗЕРНЫЙ КОМПЛЕКС «КУРЧАТОВСКИЙ»: НОВЫЕ РЕЖИМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Ковальчук М.В.[1,2,3], Панченко В.Я.[1,2,3], Назаров М.М.[1,2,3], Митрофанов А.В.[1,2,3,4], Воронин А.А.[2,4], Сидоров-Бирюков Д.А.[1,3,4], Шкуринов А.П.[2,3], Поликарпов М.А.[1], Гордиенко В.М. [3], Желтиков А.М.[1,3,4]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3] МГУ им. М.В. Ломоносова
[4] Российский квантовый центр

Созданный в НИЦ «Курчатовский институт» лазерный источник (рис. 1) обладает уникальным набором технических характеристик и функциональных возможностей, обеспечивая промежуточные уровни пиковой мощности, заполняющие разрыв между лазерными комплексами класса рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) и тераваттными лазерными системами, работающими в ряде крупных международных лабораторий. Программа научных исследований, выполняемых на лазерном комплексе «Курчатовский», направлена на решение фундаментальных естественнонаучных задач и развитие новых методов исследования физических, химических и биологических систем с рекордным временным и пространственным разрешением. Важная часть научной программы направлена на уточнение ключевых положений программы исследований XFEL, являясь важным вкладом российской стороны в программу исследований на XFEL.

В рамках выполняемой на лазерном комплексе программы планируется выйти на новый уровень исследований, связанных с реализацией двухэнергетического источника рентгеновского излучения пикосекундной длительности. Впервые будут проведены эксперименты по взаимодействию высококонтрастного фемтосекундного лазерного излучения уже суб- и релятивистской интенсивности со смешанными кластерами в режиме генерации кластерной наноплазмы. В рамках планируемых пионерских исследований будет осуществлен поиск сочетания таких атомно-молекулярных газов, которые позволят получить характеристические рентгеновские линии с большей разницей энергий.

Сверхсильные световые поля, получаемые на основе лазерного комплекса «Курчатовский», будут использованы для получения импульсного излучения терагерцового диапазона частот с большой напряженностью поля, короткой длительностью и синхронизованного во времени с импульсными излучениями других диапазонов электромагнитного излучения. Интенсивное терагерцовое излучение позволит выполнить уникальные исследования квантовой и нелинейной временной динамики возбуждения носителей в полупроводниках, в струях, возбужденных наночастиц и в объемной плазме.

В докладе будут представлены результаты теоретических исследований и первых экспериментов, направленных на изучение новых явлений пространственно-временной нелинейной динамики, возникающих при распространении сверхмощных лазерных импульсов через модельные среды и атмосферу. Реализованные на основе лазерного комплекса «Курчатовский» технологии активного формирования

мощных световых пучков с плоским поперечным профилем интенсивности позволяют наблюдать новые режимы множественной филаментации лазерного излучения и реализовать новые методы пространственно однородной временной компрессии сверхмощных лазерных импульсов. Будут представлены результаты численного анализа подобных явлений, требующего эксафлопных объемов вычислений и выполненного с использованием передовых супервычислительных ресурсов.

Рис.1. Лазерный комплекс «Курчатовский»

НЕЙТРОННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНО-НЕКОЛЛИНЕАРНЫХ СТРУКТУР

Кожевников С.В.
Объединённый Институт Ядерных Исследований
e-mail: kozhevn@nf.jinr.ru

Рассеяние нейтронов является мощным методом исследования полимеров, биологических структур и магнитных материалов. Среди большого разнообразия магнитных структур особое внимание исследователей привлекают тонкие магнитные плёнки из-за их широкого практического применения и интересной физики магнетизма на поверхности и границах раздела.

Стандартным методом исследования тонких магнитных плёнок является рефлектометрия поляризованных нейтронов. Он позволяет определять магнитные параметры многослойных структур в каждом из слоёв и на границах раздела в направлении, перпендикулярном плоскости плёнки. Наряду с большими возможностями рефлектометрия поляризованных нейтронов имеет и ряд серьёзных ограничений. Например, она не чувствительна к плёнкам толщиной более 200 нм, а также не чувствительна к неоднородностям структуры в плоскости плёнки. К тому же рефлектометрия является обратным методом, т.е. зависящим от выбранной расчётной модели для описания экспериментальных данных. Поэтому конечный результат сильно зависит от качества полученных экспериментальных данных. Таким образом, для расширения области доступных магнитных структур и для повышения надёжности экспериментов актуальной задачей является развитие новых экспериментальных методов исследования.

В данной работе приводится обзор экспериментальных методов как давно использующихся, так и развитых в последние несколько лет: Ларморовской прецессии спина нейтронов в толстых (порядка 10 мкм) магнитных плёнках, пространственного расщепления поляризованного пучка нейтронов на границе раздела двух магнитно-неколлинеарных сред, нейтронного магнитного резонанса в плёнках и метода зондовой нейтронной микроскопии.

[1] S.V. Kozhevnikov et al. // J. of Magn. and Magn. Mater., 2016, 402, с 83-93.

[2] С.В. Кожевников и др. // Физика твёрдого тела, 2014, 56, с. 63-67.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ШЕСТИВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

Кон В.Г.
НИЦ «Курчатовский институт»
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: kohnvict@yandex.ru

В [1,2] показано, что в условиях 6-волновой симметричной дифракции плоской волны при точном выполнении всех условий Брэгга коэффициент поглощения для одной из блоховских волн уменьшается более, чем в 1000 раз по сравнению с нормальным. Экспериментально этот эффект до сих пор не обнаружен. Вместе с тем было показано, что как угловая зависимость прохождения плоской волны, так и секционные топограммы имеют резкую асимметрию в направлении диагонали 6-угольника**.**

В [3] для сравнения результатов теории и эксперимента было предложено использовать секционные топограммы. Эксперимент был выполнен с использованием синхротронного излучения, а расчет – методом решения 6-волновых уравнений Такаги на суперкомпьютере. Получено хорошее совпадение, однако ценой огромного времени счета теоретических топограмм.

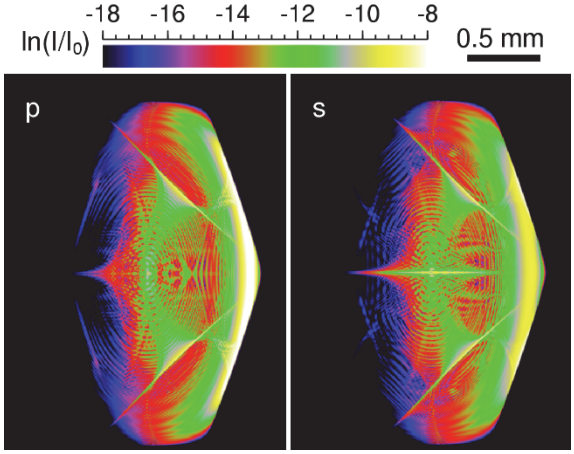


Рис.1. Секционные топограммы для разных поляризаций и для следующих параметров: кристалл толщиной 1 мм, излучение с энергией 8 кэв, расстояние 1 см.

В данной работе для расчета секционных топограмм предложено использовать метод преобразования Фурье угловой зависимости амплитуд плоских волн. Такой метод позволяет выполнить расчет на обычном ноутбуке и за короткое время, а также учесть влияние размеров щели и расстояний на структуру секционной топограммы. Предложен способ прямого измерения эффективного коэффициента поглощения излучения при 6-волновой дифракции. Первые результаты работы опубликованы в [4].

[1] Joko T., Fukuhara A. // J. Phys. Soc. Japan, 1967, vol 22, p 597-604.

[2] Afanas'ev A. M., Kohn V. G. // Acta Cryst. A, 1977, vol 33, p 178-184

[3] Okitsu K, et al. // Acta Cryst. A, 2003, vol 59, p 235-244; 2003, vol 59, p 311-316; 2006, vol 62, p 237-247

[4] Kohn V. G., Khikhukha D. R. // Acta Cryst. A // 2016, vol 72, p 349-356

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПРОФИЛИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ФОКУСИРОВАННЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

Коц И.Н.[1], Коломийцев А.С.[1], Лисицын С.А.[1]
[1] Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения ЮФУ
e-mail: vanya.kots1992@gmail.com

Применение традиционных методов наноразмерного профилирования поверхности твердых тел, основанных на процессах оптической литографии, затруднительно при создании структур размерами менее 100 нм. В связи с этим актуальной задачей является разработка и исследование новых методов, обеспечивающих достижение требуемых размеров, точности и воспроизводимости формирования наноразмерных структур. Метод фокусированных ионных пучков (ФИП) является перспективным методом решения данной задачи. В методе ФИП диаметр ионного пучка составляет 7 нм, что позволяет создавать структуры с пространственным разрешением менее 10 нм.

В данной работе экспериментальные исследования процессов профилирования поверхности кремния методом ФИП проводились с использованием двухлучевой системы Nova NanoLab 600 («FEI Company», Нидерланды) и сканирующей зондовой нанолаборатории Ntegra Vita («НТ-МДТ», Россия).

В ходе экспериментальных исследований путем ионно-лучевого травления были сформированы наноразмерные структуры в виде углублений при различных значениях параметров ФИП: количества проходов ионного луча по структуре, тока ионного пучка и времени воздействия в каждой точке. Установлено, что при увеличении тока ФИП и количества проходов глубина и диаметр наноразмерных структур возрастают нелинейно.

На следующем этапе исследований методом ФИП формировалась топология, представляющая собой массив линий, расстояние между которыми увеличивалось от 5 до 100 нм. Травление проводилось при различных значениях тока ионного пучка, времени воздействия в точке и заданной глубины травления. Установлено, что по мере увеличения тока ФИП количество отдельно различимых линий изменяется, происходит стравливание. При токе 1 пА количество отдельно различимых линий оказалось максимальным (11 шт), а ширина линии – минимальной (6 нм).

В результате выявлены закономерности влияния параметров фокусированного ионного пучка на геометрические характеристики формируемых структур, а также на разрешающую способность метода ФИП.

ПРОБЛЕМЫ ПЕРВИЧНОЙ И ВТОРИЧНОЙ ЭКСТИНКЦИИ В ДИФРАКЦИИ ОТ СИЛЬНОНАРУШЕНННЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ

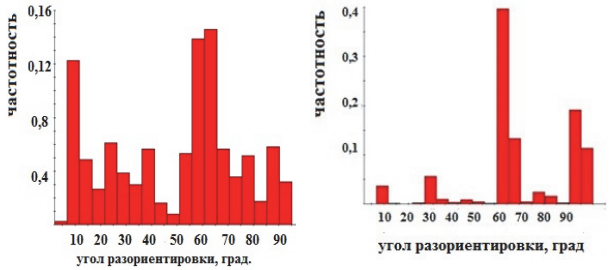
Кютт Р.Н.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
e-mail: r.kyutt@mail.ioffe.ru

Экстинкционные теории возникли в силу необходимости заполнить пробел (иногда очень большой) между параметрами монокристаллов, полученными из экспериментальных данных с использованием или кинематической, или динамической теории дифракции. Дело в том, что природные естественные кристаллы как раз и занимали это промежуточное положение. Первый вариант экстинкционной теории, разработанный Дарвиным на основе предложенной им же мозаичной модели кристалла, оперировал двумя параметрами дифракции – так называемыми коэффициентами первичной и вторичной экстинкции, которые в видоизмененном виде сохраняют свое физическое значение до сих пор. Второй всплеск интереса к экстинкции произошел в конце 60-г после появления известной статьи Захариазена. Здесь надо отметить, что в те годы интерес к экстинкционным теориям был связан с необходимостью точного определения структурных факторов из интегральной интенсиности дифракционных рефлексов, и следовательно, определения структуры кристаллов, в реальности имеющих промежуточное кристаллическое совершенство. В последние годы из-за ввода в практику достаточно толстых эпитаксиальных слоев с низким структурным совершенством, проблема вторичной экстинкции встала в связи с необходимостью измерения толщин таких слоев. В настоящей работе экспериментально измерена дифракция для серии эпитаксиальных слоев III-нитридов разной толщины, состава и структурного совершентсва и проанализирована их интегральная интенсивность с точки зрения влияния на нее экстинкции (в оновном вторичной). Отметим, что в отличие от вторичной экстинкции - первичная экстинкция – это динамические эффекты внутри когерентно расссеивающих областей, которые зависят не только от размеров этих областей, но и от их формы. В случае пленок III-нитридов с регулярной перпендикулярной поверхности системой дислокаций эти области, скорей всего, должны напоминать цилиндры, нормальные к поверхности. Поскольку пленки имели большую плотность дислокаций (109 – 1010 см-2) коэффициент первичной экстинкциии приравнивался 0 и путем измерения интегральной интенсивности двух порядков отражения определялись 2 параметра – коэффициент вторичной экстинкции и толщина эпитаксиального слоя. Для слоев с эффективной толщиной порядка 10-20 □m (в интервале чувствительности интегральной интенсивности) получены ее значения, согласущиеся как для двух геометрий дифракции, так и с измерениями уровня поглощения. И если в двухволновоой дифракции коэффициент вторичной экстинкции представляет собой величину, определяемую эмпирически, то для трехволновой дифракции все обстоит намного сложнее. И прежде всего потому, что мы не знаем зависимости интегральной интенсивности от толщины кристалла, и ее следует тоже определить. В частности, для самой интенсивной трехволновой комбинации 1-100/ -1101 полученные знаачения интегральной интенсивности для пленок толщиной заведомо большей глубины проникновения, определяемой поглощением (от 50 до 200 □m), имеют заметные различия, доказывающие существование вторичной экстинкции. К сожалению, провести ее численный анализ в настоящее время не представляется возможным.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ДВУХФАЗНЫХ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ ОБРАТНО-ОТРАЖЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Леонов В.П., Козлова И.Р., Перов С.Н., Пташник А.В.
ФГУП ЦНИИ КМ «Прометей»
e-mail: mail@crism.ru

Методом дифракции обратно-отраженных электронов проведены систематические исследования кристаллографических характеристик структурных составляющих титановых сплавов с различными типами структуры. Обнаружено, что спектр разориентировок межзеренных границ в альфа-фазе глобулярной и пластинчатой морфологии имеет принципиальное различие. Глобулярные структуры характеризуются непрерывным спектром случайных разориентировок с охватом всего возможного диапазона, пластинчатые структуры имеют ограниченный набор вариантов разориентировок с дискретным их распределением (рисунок 1).



а) *б)*

Рис.1. Спектр разориентировок в альфа-фазе исследуемых титановых сплавов с глобулярным (а) и пластинчатым (б) типом структуры.

Известно, что характер разориентировок соседних кристаллитов представляет одну из важнейших характеристик зеренной структуры и влияет на пластическое течение металлов. [1,2] Показано, что большие углы разориентировки мезеренных границ в структуре пластинчатого типа обуславливают повышенную микронеоднородность их пластического деформирования. Таким образом, различная топология элементов структур исследуемых титановых сплавов предопределяет различные особенности механизма их деформации.

[1] Даниленко В.Н., Миронов С.Ю., Беляков А.Н., Жиляев А.П. //Заводская лаборатория, диагностика материалов, 2012, том 78, № 2, с.28-46.

[2] Рыбин, В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. 224 с.

РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В ФАРМАЦИИ

Лобанов Н.Н.
ФГАОУВО «Российский университет дружбы народов»
e-mail: nlobanov@sci.pfu.edu.ru

В работе показаны различные возможности использования рентгендифракционных методов в фармации при сертификации лекарственных препаратов, контроля качества исходных субстанций и полученных препаратов.

Исследовано влияние различных технологий получения и использования различных полимерных матриц на тип и содержание полиморфных модификаций рисперидона в полученных препаратах по рентгендифракционным данным. Для оценки доли содержания поликристаллического рисперидона в полученных препаратах была использована степень кристалличности. Результаты сопоставлены с данными по определению содержания рисперидона в образцах методом ВЭЖХ, спектрофотометрическим методом по поглощению в УФ на 276 нм и высвобождению рисперидона на 27 день по максимумам величин, полученных в соответствующих методах. Наилучшая корреляция степени кристалличности наблюдалась с данными высвобождения рисперидона на 27 день.

Исследованы структурные особенности субстанций ибупрофена производства Китай и BASF и некоторых коммерческих лекарственных форм ибупрофена и нурофена, производимых и поставляемых в России и производимых и продаваемых за рубежом. Все исследованные субстанции и препараты содержали преимущественно полиморфную форму Racemic-ибупрофена, однако наблюдались некоторые отличия в размерах кристаллических решеток. Объемы элементарных ячеек субстанций отличались более, чем на 30 Å3.

Исследовано рентгендифракционными методами влияние технологий получения и последующей микронизации на тип и содержание полиморфных модификаций глицина, галавита и др.

Проведенные исследования свидетельствуют о необходимости использования рентгендифракционных методов в фармации, т.к. только они дают непосредственно информацию о кристаллическом строении препарата, состоянию молекул в препарате, их полиморфных формах, что существенно может сказаться на эффективности лекарственных препаратов.

РАЗВИТИЕ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ДЛЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Марченков Н.В., Благов А.Е., Писаревский Ю.В, Куликов А.Г., Просеков П.А., Кондратьев О.А., Ковальчук М.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: Marchenkov_nv@nrcki.ru

В работе представлены примеры применения рентгеновской дифракции для исследования функциональных свойств пьезоэлектриков и изучения поведения их дефектной структуры под воздействием электрического поля.

Предложены и реализованы подходы к исследованию пьезомодулей кристаллов различных сингоний на основе рентгеновских методов квазимноговолновой дифракции и трехкристальной дифрактомерии. Эти методики позволяют определять пьезокоэффициенты по измерению изменения параметра решетки, вызванного воздействием на кристалл внешним электрическим полем [1]. Данные методы были апробированы, была произведена оценка их потенциала и представлено сравнение с методов двухкистальной дифрактометрии высокого разрешения.

В кристалле парателлурита был обнаружен эффект образования медленно релаксирующих неферроидных доменов при воздействии на кристалл постоянным электрическим полем [2]. Эти домены отличаются от известных ранее для ферроиков (фероромагнетиков, ферроэлектриков, ферроэластиков). Данный эффект характеризуется существованием порогового напряжения (при котором начинают формироваться домены) и длительным временем установления равновесного состояния (вплоть до нескольких часов, в зависимости от напряженности прикладываемого поля). Кристалл возвращается в исходное монодоменное состояние также в течение нескольких часов после выключения электрического поля. С помощью трехкристальной дифрактомерии было установлено, что домены, сохраняя исходную параэластическую тетрагональную фазу, поворачиваются относительно друг друга в пространстве без изменения величины параметра решетки. Характерный размер доменов составлял 2-4 мм в зависимости от напряженности прикладываемого поля. На сегодняшний день точный механизм образования этих доменов непонятен. Обсуждается аналогия подобного эффекта с поведением жидких кристаллов в условиях внешнего электрического поля.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-32-60045 мол_а_дк).

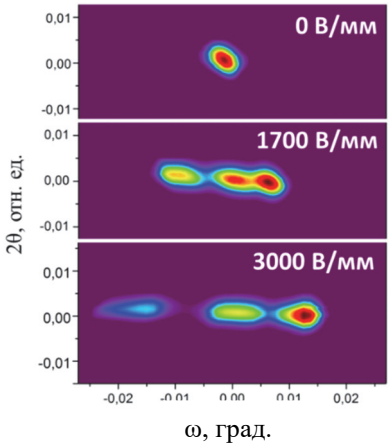


Рис.1. Результаты 2D-картирования рефлекса (220) кристалла TeO_2 в отсутствие электрического поля и при воздействии поля различной напряженности.

[1] Blagov A.E., Marchenkov N.V., et al., Cryst. Rep. 49-53 (2013) 58.

[2] M. V. Kovalchuk, A. E. Blagov, et al., Cryst. Rep. 862–866 (2014) 59.

МЕТОДЫ ТРЕХМЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ В ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Михуткин А.А.[1], Васильев А.Л.[1,2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт кристаллографии РАН
e-mail: a.vasiliev56@gmail.com

Электронная микроскопия, в том числе растровая электронная микроскопия (РЭМ), растровая электронно-ионная микроскопия (РЭИМ), просвечивающая и просвечивающая растровая электронная микроскопия (ПЭМ и ПРЭМ, соответственно), в настоящее время является одним из наиболее информативных методов в исследовании различных объектов. В настоящее время интенсивно развиваются методы трехмерной реконструкции, которые можно разделить на: реконструкцию поверхностей в РЭМ, объема в РЭИМ, ПЭМ и ПРЭМ. Все эти методы позволяют численно охарактеризовать исследуемый объект. В работе будут представлены результаты реконструкции поверхности в РЭМ (стереофотограмметрический метод, позволяющий по двум (трем) РЭМ-изображениям, полученным под различными углами эуцентрического наклона образца, реконструировать поверхность) и объемной реконструкции в РЭИМ на основе комбинации фокусированного ионного пучка и РЭМ (послойном стравливании объекта с регистрацией изображений срезов). В последнем случае данные могут варьироваться регистрацией вторичных, обратно-рассеянных электронов, характеристического рентгеновского излучения, вторичных ионов и т.п., что дает возможность получать информацию различного свойства. В работе представлены примеры исследований: сверхпроводящих проводов Nb_3Sn (рис. 1), частиц $CaCO_3$ и т.п. В методе электронной томографии ПЭМ/ПРЭМ исследуемый объект реконструируется по серии проекций, полученных в некотором диапазоне углов наклона. Метод применялся к исследованию частиц палыгорскита, пористых частиц $CaCO_3$, модифицированных наночастицами Ag, ряда биологических объектов.

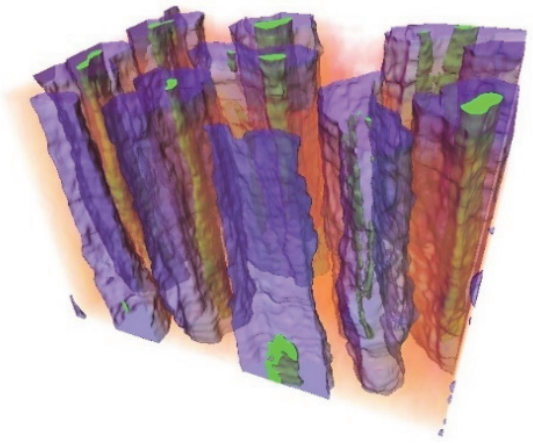


Рис.1. Трехмерная реконструкция сверхпроводящих волокон Nb3Sn: волокна показаны фиолетовым цветом, сердцевины волокон (Nb) - зеленым цветом, бронзовая матрица - оранжевым цветом.

О НОВОЙ ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ РОСТА КРИСТАЛЛОВ

Мкртчян А.Г.[1], Кочарян В.Р.[1,2]
[1] Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения
[2] Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация
e-mail: amkrtchyan@sci.am

В настоящей работе рассмотрена возможность использования Альпикограмм [1,2] для исследования динамики процессов подвижности дислокации, точечных дефектов или пространственных нарушений под влиянием внешних акустических воздействий.

[1] A.R.Mkrtchyan et al. Report January 1998-June 1999, FZR-271, September 1999 ISSN 1437-322X, p-27

[2] A.R. Mkrtchyan et al. V International Symposium Radiation from Relativistic Electrons in Periodic Structures, September, p.45, 2001.

АКУСТИЧЕСКИЙ МОНОХРОМАТОР РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Мкртчян А.Р.[1,2], Мкртчян А.Г.[1], Кочарян В.Р.[1,2], Мовсисян А.Е.[1]

[1]Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения

[2]Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация

e-mail: malpic@sci.am

На базе фундаментальных исследований, выполненных в ИППФ НАН РА сконструирован и изготовлен акусторентгеновский-монохроматор, работающий без гармоник, с большой и управляемой светосилой на основе кварцевых монокристаллов, работающих при геометрии Лауэ при внешних акустических полях.

Эксперименты проведены на двухкристальной схеме с АМ и Брэгг монохроматором. На расстоянии 19см от АМ расположен кристалл- анализатор кварца X - среза толщиной 0.9мм и на рис1. приведена кривые качания по схеме (n,-n) в геометрии Лауэ. Для исключения дисперсии при схеме (n,-n) было выбрано семейство отражающих атомных плоскостей (10 $\bar{1}$ 1) кристалла кварца. Для сравнения были сняты кривые качания при тех же условиях эксперимента, использован АМ монохроматор геометрии Брэгга.

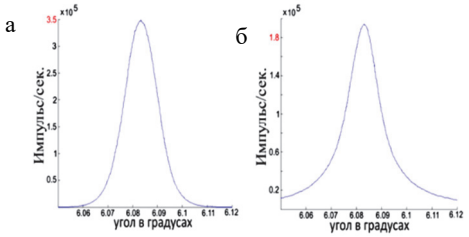


Рис.1. Кривые качания кристалла кварца, полученные от семейства отражающих атомных плоскостей (10$\bar{1}$1) по схеме (n,-n) в случаях, когда падающий монохроматический пучок получен а) акустическим монохроматором б) Брэгг монохроматором.

Из сравнения полученных результатов видно, что с АМ монохроматором полученный рентгеновский пучок более монохроматичен и 2 раза интенсивнее по сравнению с Брэгг монохроматором, отсутствует фон, функция распределения интенсивности гладкая и симметричная, что свидетельствует об отсутствии поглощения.

Акустические монохроматоры АМ дают возможность варьировать рабочее пространство временным параметром:

- степень монохроматичности $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 10^{-3} \div 10^{-5}$
- угловая расходимость $\Delta\theta \approx 2'' \div 3'$
- фокусное расстояние $(-\infty, +\infty)$
- светосила ~2 раза больше $\pm 3\%$

АТОМНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ И РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ В СТРУКТУРЕ СПЛАВА $CO_{80}P_{20}$

Модин Е.Б.[1,2], Пустовалов Е.В.[2], Плотников В.С.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Дальневосточный Федеральный Университет

e-mail: modin.evg@gmail.com

Аморфные и нанокристаллические сплавы (АМС) Co-P представляют интерес благодаря их магнитным и механическим свойствам, коррозионной стойкости [1,2]. Покрытия на основе Co-P могут быть использованы в качестве альтернативы хромовым, а также для применения в качестве магнитных экранов и магнитных микро-устройств. Структура материала и история его термической обработки определяют последующие функциональные характеристики, поэтому важным является понимание процессов, происходящих в структуре в различных диапазонах температурного воздействия. Эта работа касается in-situ исследования структуры сплава $Co_{80}P_{20}$ методом ВРПЭМ при низкотемпературном отжиге.

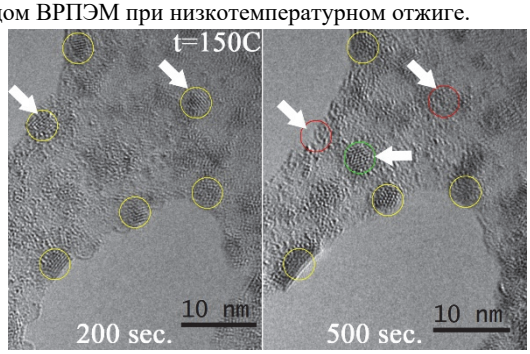


Рис.1. Параллельно с образованием зародышей, наблюдается их растворение.

Как было показано в [3,4] пленки АМС имеют структурные неоднородности, связанные с флуктуациями плотности вещества, состава, толщины. Исследования показывают, что на границах таких неоднородностей процессы структурной релаксации и кристаллизации происходят уже при температуре 150°C. Показано, что наряду с ростом нанокристаллов на начальной фазе процесса кристаллизации, может наблюдаться их растворение. Визуализирована скорость зарождения и плотность зародышей, их взаимное влияние. Данные могут быть использованы для оценки диффузионной подвижности атомов и прогнозирования стабильности функциональных сплавов. При поддержке РФФИ 15-02-06545А и Ресурсного Центра Зондовой и Электронной Микроскопии (Курчатовский Комплекс НБИКС- технологий, НИЦ “Курчатовский институт”)

[1] D. Seifzadeh et al. JMEPEG (2014)23:4109–4121.

[2] I. Kosta et al. / Surf. & Coat. Tech. 207(2012)443–449

[3] S.S. Grabchikov et al. Russian Metallurgy, Vol.2011, No.5, pp.465–470.

[4] E.V. Pustovalov et al. Bull. of the Rus. Academy of Sciences. Physics, 2014, Vol.78, No.9, pp. 890–893

СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ

Мороз Э.М.
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
emoroz@catalysis.ru

Важным моментом аттестация наноматериалов является установление фазового состава, структурных особенностей составляющих его фаз и их локальной структуры. Эту информацию можно получить, используя рентгенографический метод радиального распределения электронной плотности (РРЭП), называемый также методом распределения парных функций (PDF-method) [1]. В нем, в отличие от известного метода EXAFS, получают абсолютные значения величин межатомных расстояний и координационных чисел для нескольких координационных сфер в структуре, что определяет его применение для диагностики фаз с размерами области когерентного рассеяния менее 3 нм. Фазовый анализ проводится по совокупности межатомных расстояний и координационных чисел, характерных для каждой фазы.

Разработанный в Институте катализа сравнительный метод [2] основан на сопоставлении модельных кривых РРЭП, рассчитанных для массивных структур такого же химического и предполагаемого фазового состава, что и исследуемый наноматериал. Важной особенностью метода является то, что для вычисления кривой РРЭП не требуется никаких предположений о структуре исследуемого нанообъекта. Для расчетов кривых РРЭП были получены дифракционные картины на станции синхротронного и тетрагерцового излучения в Сибирском Центре синхротронного излучения (ИЯФ СО РАН), что дало возможность использовать эффект аномального рассеяния, повысить прецизионность

В докладе будет проведен анализ источников ошибок при проведении эксперимента и расчета кривых РРЭП, сравнение двух методов определения локальной структуры – метода РРЭП и метода EXAFS. Будут приведены примеры исследования структуры гетерогенных нанокатализаторов различного химического состава.

[1] S.J.L.Billinge // Z.Kristallogr. 2007. Suppl. V.26. P.17
[2] Э.М.Мороз // Успехи химии. 1992. Т.61. С.356
[3] Э.М.Мороз // Успехи химии 2011. Т.80. С315

РЕЗОНАНАСНАЯ ДИФРАКЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ RDP И KDP

Овчинникова Е.Н.[1], Бютье Г.[2], Коллинз С.П.[3], Нисбет Г.[3], Рихтер К.[4], Новиков Д.В.[5], Мухамеджанов Э.Х.[6], Акимова К.А.[1], Орешко А.П.[1], Дмитриенко В.Е.[7]
[1] МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет
[2] Univ. Grenoble Alpes, SIMAP, F-38000 Grenoble, France
[3] Diamond Light Source, Harwell Science & Innovation Campus, Didcot, Oxfordshire OX11 0DE, United Kingdom
[4] Institut f¨ur Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany
[5] Deutsches Elektronen-Synchrotron, DESY, Photon Science, Hamburg, Germany
[6] НИЦ «Курчатовский институт»
[7] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

В работе демонстрируются возможности резонансной дифракции синхротронного излучения для исследования сегнетоэлектриков дигидрофосфата рубидия (RDP) и дигидрофосфата калия (KDP). Энергетические спектры «запрещенных» отражений в этих кристаллах были измерены на синхротронах третьего поколения в широком интервале температур при энергиях падающего излучения вблизи краев поглощения металла. При фазовом переходе наблюдался резкий скачок интенсивности запрещенных отражений, что объясняется снятием запрета на диполь-дипольное резонансное рассеяние. В параэлектрической фазе наблюдался рост интенсивности отражений и перестройка энергетических спектров. Сочетание измерений и новых теоретических подходов с использованием ab initio численного моделирования позволило разделить вклады в энергетические спектры запрещенных отражений: диполь-квадрупольный, термоиндуцированный и вклад, соответствующий мгновенным конфигурациям, образованным атомами водорода, а также извлечь информацию о концентрации различных конфигураций водорода при разных температурах.

[1] Richter C., Novikov D. V., et al..// Phys. Rev. B 2014. V. 89, P. 094110 (1-9).

[2] Beutier G., Collins S. P., et al. // Phys. Rev. B 2015. V. 92, P. 214116 (1-11).

КОМПЛЕМЕНТАРНЫЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИЯХ МАТЕРИАЛОВ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

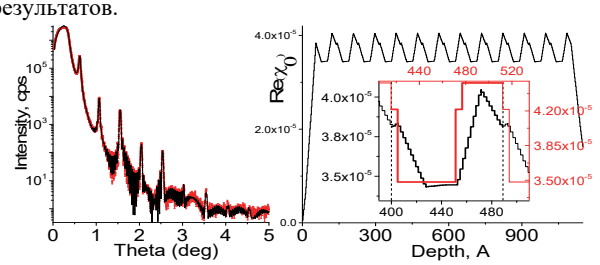
Пашаев Э.М., Субботин И.А., Пруцков Г.В., Лихачев И.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: elkhanpashaev@gmail.com

Развитие микро - и нанотехнологий предопределило и дальнейшее развитие методов их диагностики. Изменение свойств материалов при переходе к наноразмерным величинам, т.е. свойства наноразмерных слоёв (однородность, кристалличность, деформация решетки и резкость гетерограниц) определяют характеристики готового изделия, и требует развития не только отдельных методов диагностики структуры, но и комплексного их исследования.

Применение комплементарных методов диагностики позволяет не только резко повысить достоверность полученных параметров реальной структуры наноразмерных объектов, но и установить связь структурных параметров с их физическими свойствами.

В предлагаемой работе приводятся результаты исследований реальной структуры наноразмерных многослойный систем (в том числе металлических и полупроводниковых сверхрешеток) различными методами. Исследования проводились методами прецизионной рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии, а также в некоторых случаях - методами электронной микроскопии. На основе полученных экспериментальных данных проводился их совместный анализ. Приводятся результаты исследований ряда перспективных материалов спинтроники (многослойные периодические системы Fe-Cr-Gd, Gd-Dy, Si/EuO и ряда других).

На рисунке приводится кривая рентгеновской рефлектометрии для многослойной периодической структуры Fe-Cr-Gd ($CuK_{\alpha 1}$- излучение). В правой части дан профиль распределения реальной компоненты поляризуемости χ_0 по глубине для всей структуры согласно экспериментальным данным. График содержит вставку как с экспериментальным распределением данной компоненты в рамках одного периода (черный), так и распределение согласно ростовой модели. Аналогично были рассчитаны профили распределения компоненты χ_0 для длин волн 1.7438Å и 2.0733Å, лежащими вблизи краев поглощения Fe и Cr, соответственно, и основанные на использовании единой для всех экспериментов модели. Следует подчеркнуть, что данные резонансной рентгеновской рефлектометрии находятся в хорошем согласии с электронно-микроскопическими результатами, а их совместный анализ является взаимно дополняющим, что позволяет повысить достоверность полученных результатов.



ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ, СОСТАВ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ CUO, ПОКРЫТЫХ ПЛЕНКОЙ МЕДИ

Пашаян С.Т.[1], Анищик В.М.[2]
[1] Институт физических исследований НАН Армении
[2] Белорусский Государственный Университет
e-mail:svetlana1207@yahoo.com

Оксиды меди известны как перспективный материал для использования в газовых сенсорах, электрохимических источниках тока, высокотемпературных сверхпроводниках, солнечных батареях, мемристорных структурах и многих других устройствах современной науки и техники. Исследовано влияние излучения YAG:Nd^{3+}-лазера на микроструктуру поверхности, элементный состав и электрические свойства монокристаллов оксида меди, покрытых тонкой медной пленкой. Результаты сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и рентгеновского энергодисперсионного анализа (EDX) показывают, что под воздействием лазерного излучения кардинально изменяется морфология поверхности и химический состав приповерхностного слоя исследуемых образцов. На рис. 1 представлена микрофотография поверхности одного из образцов, полученная с помощью сканирующего электронного микроскопа “VEGA TS5130MM”.

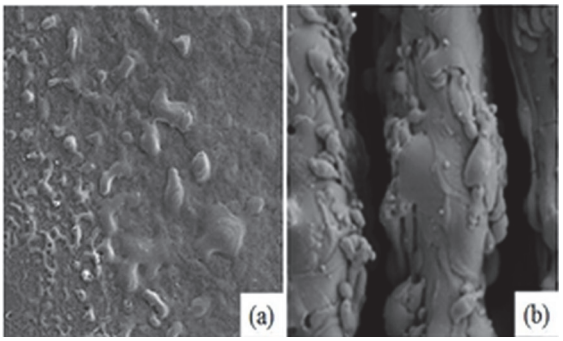


*Рис.1. Микрофотография поверхности образца CuO/Cu после обработки лазером с плотностью энергии излучения F = 1, 9 Дж/см² (1*a *) и F = 30 Дж/см² (1*b *). Увеличение - 1000x.*

Вольтамперная характеристика исследуемых монокристаллов имеет гистерезисный характер, что демонстрирует наличие у них эффекта памяти. По данным температурной зависимости сопротивления образцов до и после лазерного облучения рассчитана энергия активации проводимости. Установлено, что увеличение плотности энергии лазерного излучения до 30 Дж/см^2 приводит к изменению сопротивления монокристаллов уже при комнатной температуре и значительному росту энергии активации. Значение ширины запрещенной зоны оксидов меди лежит в интервале, оптимальном для эффективного преобразования солнечной энергии и хорошо согласуется с солнечным спектром [1, 2].

[1] H. Kidowaki, T. Oku, T. Akiyama, A. Suzuki. Journal of Materials Science Research., 2012, V.1 (1), pp. 138–139.

[2] T. Minami, Y. Nishi, T. Miyata, J.I. Nomoto. Appl. Phys. Express, 2011, V. 4, № 6, p.p. 062301–062303.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ТОПОГРАФИЯ НА СИНХРОТРОННОЙ СТАНЦИИ МЕДИАНА

Подурец К.М., Калоян А.А., Коваленко Е.С.
НИЦ «Курчатовский институт
alexander.kaloyan@gmail.com

При съемке топографии результатом эксперимента, как правило, является одно изображение, которое представляет собой внутреннюю структуру объекта. Выявление особенностей наблюдаемой структуры является непростой задачей. Применение углового сканирования делает возможным получение информации о кривой качания в каждой точке изображения.

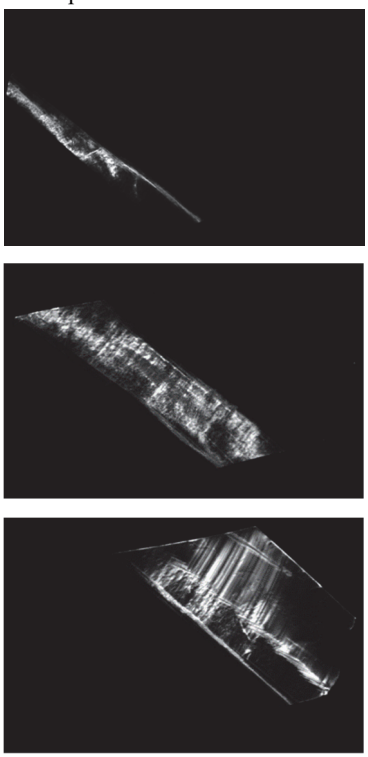


Рис.1 Топограммы кристалла ZnGeP2 при значениях 30, 104, 128 угл.сек.

Кристаллы ZnGeP2 имеют нелинейное поведение в инфракрасной области и их свойства зависит от качества кристалла [3]. Были изучены несколько кристаллов с использованием количественной топографии на синхротронном излучении. Были использованы асимметричный монохроматор кремний (511) и отражение образца (336) с практически нулевой дисперсией. Кристаллы демонстрируют макроскопическую кривизну, субзерна, полосатость роста и другие дефекты. Тем не менее, ширина кривых качания в некоторых регионах продемонстрировала высокую кристаллическую совершенство. Результаты будут полезны для улучшения процесса роста.

1. D. Lübbert, T. Baumbach, J. Härtwig, E. Boller, E. Pernot, Rev . Nucl.Instrum.Meth, B 160, (2000), 521.

2. A.G. Afonin, V.T. Baranov, V.A. Maisheev et al, Instrum. Exp. Tech. 56 (2013), 617.

3. G.A. Verozubova, A.O. Okunev, A.I. Gribenyukov et al, Journal of Crystal Growth 312 (2010) 1122.

АЛМАЗНЫЕ РЕНТГЕНОВСКИЕ ПРЕЛОМЛЯЮЩИЕ ЛИНЗЫ С БОЛЬШОЙ АПЕРТУРОЙ

Поликарпов М.В.,[1] Снигирева И.И.[2], Снигирев А.А.[1]
[1] *Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград, Россия*
[2]*European Synchrotron Radiation Facility, Гренобль, Франция*
e-mail: polikarpov.maxim@mail.ru

Интенсивное развитие рентгеновской оптики породило преломляющие рентгеновские линзы, которые стали стандартными элементами на источниках синхротронного излучения 3-го поколения. В наших работах [1-4], преломляющие линзы впервые были изготовлены лазерной обработкой моно- и поликристаллических пластин алмаза, толщиной до 1.2 мм, выращенных методами CVD и HPHT. Разнообразные линзы с апертурами до 1 мм и радиусами вершин параболоида до 500 мкм (рис.1) были изготовлены и изучены методами СЭМ, АСМ, Рамановской спектроскопии и, конечно же, в ходе рентгеновских тестов. Такие линзы были успешно протестированы как в режиме передачи изображения, так и в режиме фокусировки на лабораторных и синхротронных источниках рентгеновского излучения.

Данное исследование демонстрирует, что лазерные технологии обеспечивают прямой способ производства алмазных преломляющих линз с большой апертурой, высоким качеством профиля и субмикронной шероховатостью поверхности. Уникальные оптические свойства алмаза, дополненные его отличными тепловыми свойствами (высокая теплопроводность, низкий коэффициент расширения, высокая температурная стабильность) позволяют применять такие линзы на высокомощных пучках современных и будущих источников рентгеновского излучения.

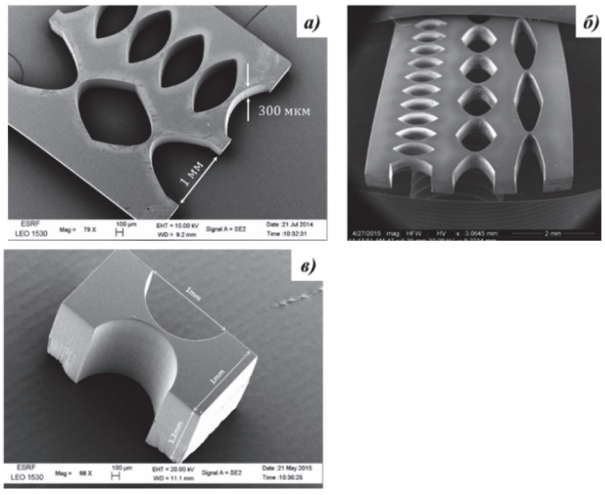


Рис. 1. Одномерные преломляющие линзы из моно- (а,в) и поликристаллического (б) алмаза.

[1] M. Polikarpov et al.//J Synchrotron Radiat, 22 (2015) 23-28.

[2] M. Polikarpov et al.// AIP Conference Proceedings, 1741 (2016) 040024.

[3] T.V. Kononenko et al.// Applied Physics A, 122 (2016) 1-6.

[4] S. Terentyev et al.// Applied Physics Letters, 107 (2015) 111108.

НОВАЯ МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ БЛИЖНЕЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ В ИНТЕРФЕЙСАХ МНОГОСЛОЙНЫХ ПЛЁНОК

Репченко Ю.Л., Якунин С.Н., Рогачёв А.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: kent160@mail.ru

Исследование ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения вблизи краев поглощения (XANES) является элементно-селективным методом изучения валентной зоны, спин-орбитальных взаимодействий, симметрии ближнего окружения твёрдых тел и т.д. Другой методикой исследование ближней тонкой структуры являются методы фиксирования спектров интенсивности отражения такие, как DAFS [1] и ReflEXASF [2-3]. Важным преимуществом данных методов является возможность получить ближнюю тонкую структуру для различных кристаллических фаз за счёт подстройки угла падающего излучения к соответствующим брэгговским максимумам. То есть проводить измерения при фиксированном векторе рассеяния qz. В данной работе будет опробована методика определения ближней тонкой структуры в интерфейсах многослойных плёнок за счёт сравнения спектров отражения полученных при векторах рассеяния qz соответствующих положению максимума структурных пиков на кривой отражения и спектров отражения при qz в окрестностях данного максимума. На станции «Ленгмюр» КИСИ был проведён эксперимент, в котором была получена карта интенсивности отражения в зависимости от энергии падающего рентгеновского излучения Eph и вектора рассеяния qz для многослойной структуры [La/B]50 (рис. 1):

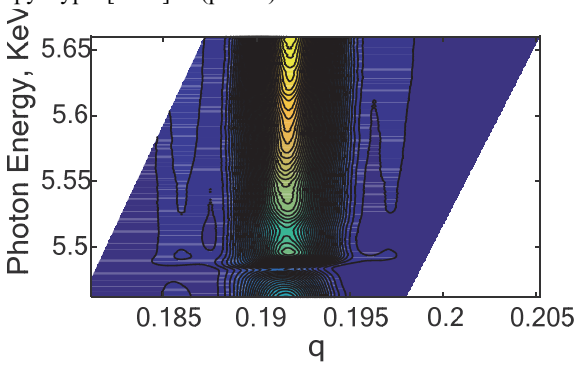


Рис.1.

На экспериментальной карте видно, что форма энергетических спектров изменяется при изменении вектора рассеяния qz. Разделение вклада реальной и мнимой части восприимчивости в интенсивность отражения будет произведено по аналогии с методикой, представленной в работе [2].

[1]. I. J. Pickering, M. Sansone, et. al.// J. Am. Chem. Soc. 1993, vol 115,p 6302.

[2]. G. Martens and P. Rabe J. Phys. // C: Solid State Phys. 1981, vol 14, p 1523.

[3]. F. Benzi, I. Davoli, et. al.// Review of Scientific Instruments 2008,vol 79,p 103902.

СИНХРОТРОННАЯ СТАНЦИЯ «ЛЕНГМЮР» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Рогачев А.В., Новикова Н.Н., Якунин С.Н.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: a.v.rogachev@yandex.ru

Синхротронная станция «Ленгмюр» предназначена для исследования двумерных систем на границе раздела фаз жидкость-газ. Набор экспериментальных рентгеновских методик, реализуемых на станции, позволяет получать информацию об элементном составе, структурной организации образца и свойствах границ раздела фаз. Отличительной особенностью станции является возможность исследования биоорганических объектов, находящихся в нативных для них условиях.

На синхротронной станции «Ленгмюр» проводятся исследования структурно-функциональной организации клеточных мембран и особенностей их взаимодействия с различным окружением, исследования процессов самоорганизации в двумерных системах на поверхности жидкости, исследования структурных и функциональных особенностей белков, содержащих металлоцентры.

Синхротронная станция «Ленгмюр» формирует пучок монохроматизированных рентгеновских фотонов с энергией в диапазоне от 5 до 20 кэВ и энергетическим разрешением не хуже $\Delta\lambda/\lambda$ $5*10^3$. Максимальный поток фотонов на позиции образца составляет 1*109@12кэВ. Рентгенооптическая схема установки включает в себя специальный блок рентгеновских зеркал, позволяющий проводить исследования образцов на поверхности жидкости.

Набор исследовательских методик доступных на синхротронной станции «Ленгмюр» в настоящее время включает в себя метод стоячих рентгеновских волн в условиях полного внешнего отражения, рентгенофлуоресцентный анализ в условиях полного внешнего отражения, метод поверхностной дифракции, рентгеновскую спектроскопию поглощения и рентгеновскую рефлектометрию.

НЕМАГНИТНЫЕ КАМЕРЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР И СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ

Садыков Р.А.
Институт ядерных исследований РАН
Институт физики высоких давлений РАН
rsadykov@inr.ru

Повышенный интерес к квантовым критическим явлениям, квантовой фрустрации и состоянию не ферми жидкостного поведения в ряде магнетиков, в том числе и под давлением, вызвало необходимость проведения прямых нейтронографических экспериментов как при низких темепературах и в сильных магнитных полях, так и при высоком давлении. В связи с этим нами были разработаны и применены ряд оригинальных немагнитных камер фиксированного высокого давления для дифракции нейтронов. Камеры имеют конструкцию, позволяющую помещать их в стандартные нейтронографические криостаты, включая криостаты растворения и криомагниты, и использовались на источниках нейтронов: SINQ (Swiss), ISIS(UK), HMI (Germany), ILL(France) на приборах высокого разрешения, спектрометрах неупругого рассеяния и дифракции поляризованных нейтронов. Исследования проводились вплоть до 40 кбар, T=100mk и H=9.5T с использованием камер, изготовленных из немагнитных сплавов 40ХНЮ (NiCrAl), TiZr (нулевая матрица) и твердых Al-сплавов (B95T, B96T). Измерения форм-фактора Ce проведенные под давлением методом рассеяния поляризованных нейтронов в $CePd_2Si_2$ показали уменьшение на 30% величины магнитного момента (P=40 кбар,T=1.4K, H=9.5T)-рис.1. Также исследовались спиральные магнитные структуры монокристаллов соединений $ZnCr_2Se_4$,MnSi и $CsCuCl_3$.

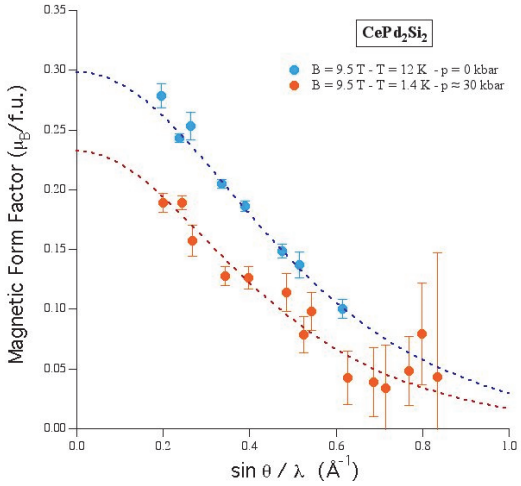


Рис.1. Форм-фактор Ce под давлением и при нормальном давлении.

СИНХРОТРОННАЯ СТАНЦИЯ «РЕНТГЕНОВСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ» НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Серегин А.Ю.[1,2], Куликов А.Г.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Мухамеджанов Е.Х.[1], Ковальчук М.В.[1,2]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: seregin.a83@gmail.com

Синхротронная станция «Рентгеновской кристаллографии и физического материаловедения» (РКФМ) расположена на Курчатовском специализированном источнике синхротронного излучения НИЦ «Курчатовский Институт». РКФМ является экспериментальной установкой, предназначенной для проведения исследований структуры материалов различными методами рентгеновской дифракции и рассеяния: дифрактометрия, рефлектометрия, картирование обратного пространства, стоячие рентгеновские волны, рентгенофлуоресцентный анализ, спектроскопия поглощения. Важной спецификой станции является возможность исследования образцов под внешним воздействием: электрическое поле, ультразвуковая нагрузка.

РКФМ включает в себя несколько функциональных модулей (рисунок 1): блок монохроматизации; модуль образца; модуль регистраций. Для монохроматизации синхротронного излучения на станции используется двухкристальный монохроматор (кристаллы Si (111) или Si (311)), позволяющий изменять энергию пучка (от 5 до 40 кэВ), сохраняя неизменным его пространственное положение. Модуль образца включает в себя коллимирующие щели и многокружный гониометр, который позволяет проводить исследования рентгеновскими методами в широком угловом диапазоне. В модуль регистрации входят сцинтилляционный и энергодисперсионный детектор, мониторы интенсивности пучка.

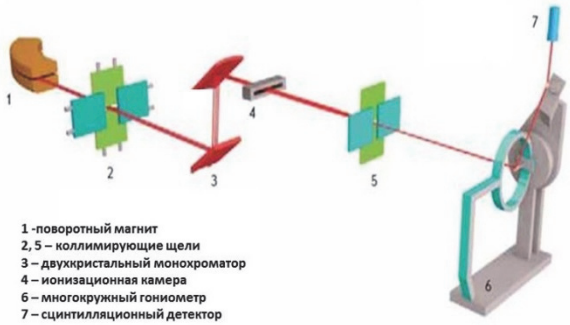


Рис.1. Оптическая схема станции РКФМ.

АНАЛИЗ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ ОТ МОНОКРИСТАЛЛОВ ЦИАНИДА КАДМИЯ

Симонов А.А.*, Coates C., Goodwin A.L.
Inorganic chemistry laboratory, University of Oxford
**e-mail: arkadiy.simonov@chem.ox.ac.uk*

Цианид кадмия интересен благодаря наличия у него рекордного отрицательного коэффициента термического рашнирения. Его значение $\alpha = \frac{dln(V)}{dT} = -61$ МК$^{-1}$ [1] по модулю превышает положительные коэффициенты термического расширения многих констукционных материалов таких как, например, медь. Механизм этого необычного свойства до конца не понятен. Большинство исследователей приписывают его фононам, приводящим к смещению атомов цианид аниона для которых характерен отрицательным параметр Грюнайзена. Однако точный рассчет дисперсионных кривых в этом материале затруднен из-за наличия разупорядочения в ориентации цианид-аниона. В средней структуре цианид-анион с равной вероятностью занимает обе ориентации. В реальной структуре различные ориентации цианид-анионов вокруг атомов кадмия будут приводить к смещениям как самих цианид-анионов, так и атомов кадмия. Таким образом локальная структура кристалла не только влияет на фононные дисперсионные кривые, но и сама может быть ответственна за отрицательное термическое расширение в случае если реориентация цианид-анионов возможна при изменении температуры.

В данной работе мы анализируем диффузное рассеяние от монокристалла цианида кадмия от разупорядоченной структуры. Анализ диффузного рассеяния – разносторонний метод, позволяющий получить информацию как о динамике [2], так и о статической структуре нано флуктуаций [3] в кристаллах.

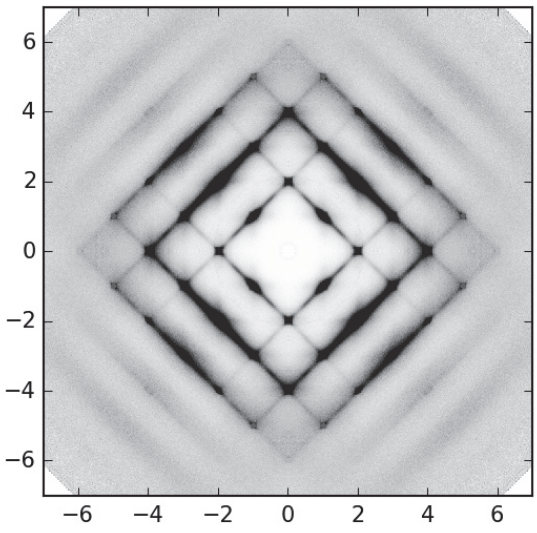


Рис.1. Диффузное рассеяние от цианида кадмия с удаленными брегговскими отражениями, слой hk0.

[1] Goodwin A. L., Kepert C. J. //Physical Review B. – 2005. – Т. 71. – №. 14. – С. 140301.

[2] Wehinger B. et al. //arXiv preprint arXiv:1608.08061. – 2016.

[3] Simonov A., Weber T., Steurer W. //Journal of Applied Crystallography. – 2014. – Т. 47. – №. 6. – С. 2011-2018.

МНОГОЦЕЛЕВАЯ НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКАЯ УСТАНОВКА «ДРАКОН»

Соменков В.А.[1], Глазков В.П.[1], Эм В.Т.[1], Гуреев А.И.[1], Садыков Р.А.[2], Трунов Д.Н.[1,2], Аксенов С.Н.1,2, Кравчук Л.В. [2], Важенцев А.И.[3].
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт ядерных исследований РАН
[3] ООО "МП РЕАБИН"
e-mail: dtrunov@inr.ru

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 7-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, начинай с томографии больших и малых (в том числе биологических объектов) и заканчивая дифракцией.

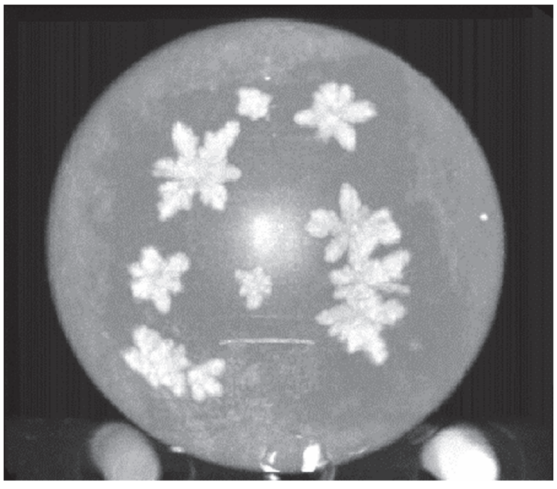


Рис.1. Объемная реконструкция образца YBCO

ГЕНЕРАЦИЯ ГАРМОНИК ВЫСОКОГО ПОРЯДКА - ИСТОЧНИК УЛЬТРАКОРОТКОГО КОГЕРЕНТНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО И РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ СОСТОЯНИЕМ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Стремоухов С.Ю.[1,2], Андреев А.В.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет
e-mail: sustrem@gmail.com

Генерация гармоник высокого порядка (ГГВП) – существенно нелинейный процесс, происходящий при взаимодействии фемтосекундного лазерного излучения с веществом [1]. Результатом такого взаимодействия является преобразование энергии лазерного поля в когерентное излучение ультрафиолетовой и рентгеновской областей спектра ультракороткой длительности по времени [2], что открывает возможности для его практических приложений. Кроме того, вариация параметров лазерного поля (количество импульсов, их спектральный состав, состояние полязризации) позволяет генерировать излучение с контролируемым состоянием поляризации [3].

Настоящая работа посвящена развитию методов ГГВП с заданными характеристиками. Исследования основаны на уникальном непертурбативном теоретическом подходе [4], который успешно применяется для описания явлений, связанных с ГГВП. Его особенностью является последовательный учет всех нелинейностей задачи о взаимодействии одиночного атома с полихроматическими произвольно поляризованными лазерными полями. В работе будут обсуждаться методы генерации эллиптически поляризованного излучения в двухчастотных лазерных полях, взаимодействующих с одиночным атомом и протяженной модельной газовой средой. Будут предложены методы повышения эллиптичности генерируемого излучения. Полученные теоретические результаты могут быть использованы для развития методик исследования сверхбыстрых процессов в конденсированных средах.

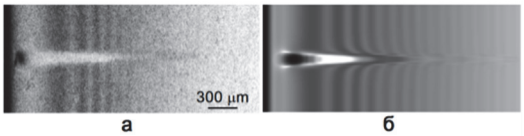
[1] Corkum P.// Phys. Rev. Lett., 1993, №1, p. 1994.
[2] Popmintchev T. et al.// Science, 2012, №336, p. 1287.
[3] Lambert G. et al.// Nat. Commun, 2015, № 6, p. 6167.
[4] Andreev A.V., Stremoukhov S. Yu. et al.// Eur. Phys. J. D, 2012, № 66, p.16.

ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ «ИЗГИБНЫХ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОЛОС» ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПРЕДЕЛЬНО СЛАБЫХ ЛОКАЛЬНЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Суворов Э.В., Смирнова И.А.
Институт физики твердого тела, РАН
e-mail: suvorov@issp.ac.ru

Предложен новый высокочувствительный метод для исследования локальных деформаций поверхности, обусловленных дефектами кристаллов. Метод основан на анализе формы «интерференционных деформационных полос» в геометрии брэгговской дифракции рентгеновских лучей. Удается количественно измерять радиусы локальных изгибов кристаллографических плоскостей от десятков до нескольких сотен метров. «Интерференционные деформационные полосы» в геометрии брэгговской рентгеновской дифракции впервые были обнаружены и описаны в работе [1], а затем исследованы теоретически и экспериментально [2,3]. Эти полосы возникают на секционных топограммах в геометрии Брэгга только при изгибе кристалла. В идеальном кристалле обычные маятниковые полосы быстро затухают. В случае изогнутого кристалла возникает новый эффект, связанный с интерференцией старого волнового поля с новым, образованным внутри кристалла за счет межветвевого рассеяния.

Возможности метода «изгибных интерференционных контуров» проиллюстрированы на примере локальных деформаций поверхности монокристаллов кремния, обусловленных «квазиточечными» дефектами. Дефекты на входной грани кристалла создавались уколом алмазного индентора при нагрузках менее 1г. На рисунке приведены фрагменты секционных топограмм а) - эксперимент и б) - численное моделирование (монокристалл кремния, Брэгговское отражение (400), излучение MoKα1, радиус изгиба кристалла 150 метров). Полученные результаты показывают, что этот метод может быть использован для измерений очень слабых деформаций поверхности [2,3]. Смещения изгибных интерференционных полос в поле дефекта позволяют определять величины локальных изгибов кристаллографических плоскостей с радиусами от нескольких десятков до нескольких сотен метров.



[1] И. Л. Шульпина, П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский, К. Т. Габриэлян // Тезисы докладов IV Всесоюзного совещания “Дефекты структуры в полупроводниках” Новосибирск, Россия: Изд-во СО АН СССР, 2, 114, 1984
[2] F. N. Chukhovskii, P. V. Petrashen’ // Acta Cryst., A.44, 8, 1988
[3] Э. В. Суворов, И. А. Смирнова, А.С.Образова // ПТЭ, 1, 178, 2015

ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ОПРЕДЕЛЕНИИ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТОВ И ИХ СВОЙСТВ

Суворова Е.И.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: suvorova@ns.crys.ras.ru

Дифракция электронов является незаменимым средством и инструментом в исследовании малых объектов вплоть до атомного уровня. Приборы для получения электронограмм, высокоразрешающих изображений и спектроскопических данных обеспечивают возможность проводить идентификацию фаз в нанокомпозитах, определять их структуру и химический состав. С помощью электронной дифракции устанавливается взаимная ориентация матрицы и включений/выделений, направления роста выделений, структура границ раздела, природа дефектов, причина появления напряжений.

В работе представлены результаты исследований структуры и свойств: высокотемпературных композитных сверхпроводников 2-го поколения на основе $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, подвергшихся облучению ионами $^{84}Kr^{17+}$; тонких сегнетоэлектрических пленок $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ на Si и кристаллов Mn_4Si_7, легированных Al, Mo, и Ge.

Установлено, что облучение проводящих композитных лент приводит к снятию напряжений в решетках буферных слоев и $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, улучшению адгезии между подложкой сплава хастеллоя и буфером из оксидов металлов. Анализ картин электронной дифракции показал, что происходит дефрагментация текстурированных пленок буфера, и на границах раздела устраняется деформация решеток MgO, $LaMnO_3$ и $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, возникшая из-за их несоответствия при эпитаксиальном росте.

Выявлено сегнетоэлектрическое поведение тонких поликристаллических пленок $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$, выращенных на Si. Причиной сегнетоэлектрических свойств является рост зерен нецентросимметричной ромбической фазы $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ со структурой $Pbc2_1$ и размерами до 10 нм.

Исследование кристаллов высшего силицида марганца Mn_4Si_7 (пр. гр. P-4c2) с примесями Al, Mo, Ge показало, что легирование приводит к образованию вторичных фаз: наблюдали выделения Ge-Si с разным соотношением, кристаллов $MoSi_2$, фаз Al-Ge-Si, обогащенных алюминием, а также выделений кубического MnSi и гексагонального Mn_5Si_3. Установлены ориентационные соотношения всех фаз с кристаллом Mn_4Si_7 и сделана оценка несоответствия решеток по разным направлениям. Напряжения в матричном кристалле инициированы, в основном, несоответствием решеток матрицы и вторичных фаз, в то время как различие в величинах теплового расширения в интервале температур от 1423 K (температура роста) до комнатной температуры приводит к деформациям на порядок меньше. Сделано заключение, что легирование может улучшить термоэлектрические свойства данного материала, однако необходимо принимать во внимание деформации, возникающие из-за несоответствия решеток матрицы и выделений вторичных фаз с последующей релаксацией в виде растрескивания кристалла.

Таким образом, анализ картин электронной дифракции, а также изображений и спектроскопических данных, приводит к объяснению свойств материалов.

МЕТОД ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА СО СКАНИРУЮЩИМ ДВУМЕРНЫМ ДЕТЕКТОРОМ НА СТАНЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ (СИ) РСА

Сульянов С.Н.[1,2], Молоденский Д.С.[1], Гогин А.А.[1]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: d.s.molodenskiy@yandex.ru

Для высокого углового разрешения на дебаеграмме при двумерной регистрации дифракционной картины необходимо достаточно большое расстояние образец-детектор. Применение большого стационарного детектора, покрывающего большую область углов, затруднительно. Хорошим решением является использование сканирующего двумерного детектора, что применено на станции СИ рентгеноструктурного анализа (РСА) [1]. Станция построена по стандартной оптической схеме, включающей зеркало-конденсор, монохроматор с саггитальным изгибом второго кристалла и фокусирующее зеркало. Гониометр обеспечивает независимое вращение исследуемого образца вокруг двух горизонтальных осей (ω, φ) и двумерного детектора вокруг оси *2θ*, которая коаксиальна ω (Рис.1.). Вращение детектора в вертикальной плоскости позволяет получить высокое качество данных до больших величин $\sin\theta/\lambda$.

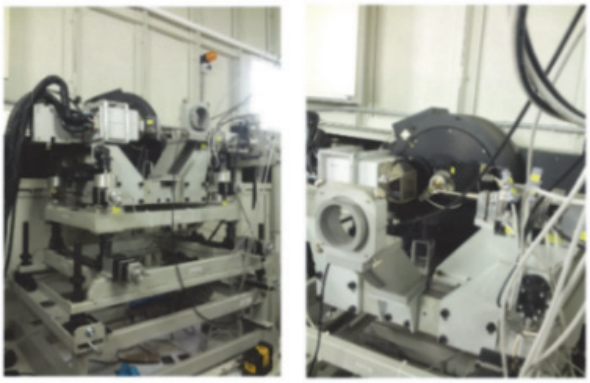


Рис.1. Общий вид дифрактометра станции РСА

При двумерной регистрации не только сокращается время съёмки и резко снижается ошибка статистики счёта, но и устраняются систематические погрешности, связанные с конусностью, снижается влияние зернистости и преимущественной ориентации [2]. Для станции было разработано специализированное программное обеспечение, учитывающее поправку интенсивности падающего пучка на поглощение в цилиндрическом образце [3] и поляризацию [4,5]. Воспроизводимость положений двумерного детектора при вращении вокруг горизонтальной оси 2θ, многократно определённая по пикам эталона LaB6, составила не хуже $\Delta 2\theta = 0.001^o$. Для эталона LaB6 проведено уточнение структуры LaB6 методом Ритфельда. Зависимости интенсивность – угол дифракции получена расчётом по двумерной картине, измеренной на малом отладочном токе вигглера. Брэгговский R – фактор составил 1.5%.

[1] Хейкер Д.М., Ковальчук М.В. и др.// Кристаллография, 2007, том 52, №6, с 1145-1152

[2] Sulyanov S.N., Kheiker D.M. etc. // J. Appl. Cryst., 1994, V.27, pp. 934 – 942

[3] Sulyanov S.N., Gogin A.A. and Hans Boysen // J. Appl. Cryst., V.45, pp. 93-97

[4] Sulyanov S.N., P. Dorovatovskii and Hans Boysen // J. Appl. Cryst., V. 47, pp. 1449-1451

[5] Молоденский Д.С., Сульянов С.Н. // Кристаллография, 2015, том 60, №3, с 496-498

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛОВ В УСЛОВИЯХ ВИБРАЦИОННЫХ НАГРУЗОК РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Таргонский А.В.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Просеков П.А.[1,2], Элиович Я.А.[1,2], Аккуратов В.И.[1], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

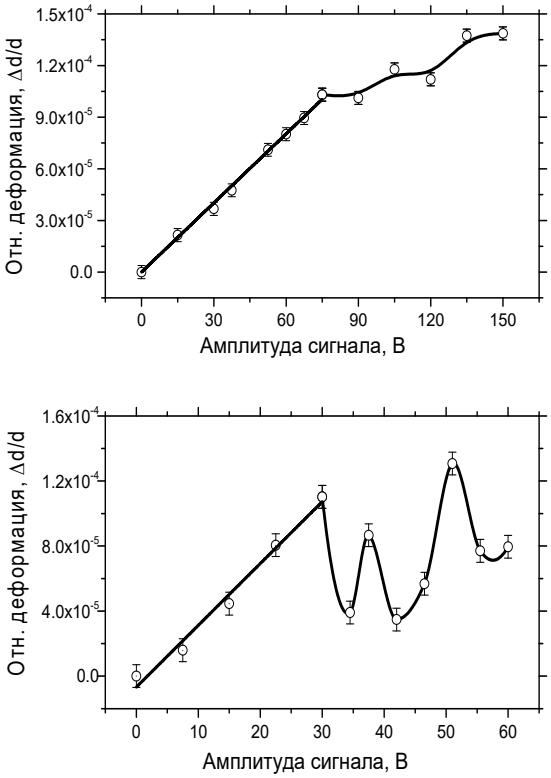
[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: targonsky@crys.ras.ru

Разработан и применен основанный на рентгеноакустических взаимодействиях [1-2] метод исследования влияния вибрационных воздействий на дефектную структуру кристаллических материалов, являющихся перспективными для использования в микроэлектронике и фотонике.

Исследования проводились с помощью анализа распределения интенсивности дифрагированного рентгеновского пучка, при этом возможности разработанных рентгенооптических схем и экспериментального оборудования позволяли использовать несколько режимов: интегральный, стробоскопический и покадровый (времяразрешающий). Выявлены существенные различия эволюции дефектной структуры кристаллов кремния, кварца, фторида лития и парателлурита при увеличении амплитуды вибраций, а также во времени при постоянной амплитуде колебаний и снятии нагрузки. На рисунке представлены зависимости относительной деформации кристаллической решетки от амплитуды подаваемого возбуждающего сигнала для кристаллов фторида лития и парателлурита.

В результате проведенных исследований установлено, что в кристалле кремния относительная деформация решетки линейно возрастает с амплитудой напряжения и после определенного значения кристалл разрушается (время переходного процесса менее 100 мс). В кристаллах фторида лития и парателлурита обнаружено ненаблюдаемое ранее образование нестационарных дефектов, что свидетельствует об изменении внутренних напряжений во времени (и пространстве) в условиях внешней ультразвуковой модуляции. Важно отметить, что кристалл возвращается к исходному состоянию при снятии нагрузки спустя некоторое время.



Зависимость относительной деформации от амплитуды ультразвукового воздействия для исследуемого кристалла фторида лития и парателлурита.

Таким образом, обнаружена перестройка дефектной структуры кристаллических материалов при амплитудах внешних воздействий, не превышающих предел прочности, которые тем не менее могут оказать влияние на функциональные свойства созданных на их основе устройств, работающих в неблагоприятных внешних условиях.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №14-22-01042 офи_м и 16-29-14057 офи_м.

[1] Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др. // ЖЭТФ. 2005. Т.128. Вып. 5(11). С. 893

[2] Ковальчук М.В., Таргонский А.В., Благов А.Е. и др. // Кристаллография, 2011, том 56, № 5, с 886-889

ДИФРАКЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С ПИКОСЕКУНДНЫМ ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ НА КАНАЛЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВЭПП-4 ИЯФ СО РАН: ЛАЗЕРНЫЙ НАГРЕВ, УДАРНЫЕ ВОЛНЫ, ДЕТОНАЦИЯ

Толочко Б.П.[1,3], Аульченко В.М.[3], Евдоков О.В.[1], Тен К.А.[2], Косов А.В.[3], Аракчеев А.С.[3], Назьмов В.П.[3], Шехтман Л.И.[3], Жуланов В.В.[3], Прууэл Э.Р.[2], Бурдаков А.В.[3], Золотарев К.В.[3], Кулипанов Г.Н.[3]

[1] Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
[2] Институт гидродинамики им. М.А.Лаврентьева СО РАН
[3]Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера СО РАН
e-mail: B.P.Tolochko@inp.nsk.su

Разрабатываемая аппаратура предназначена для исследования быстропротекающих процессов в твердом теле, сопряженных с изменением кристаллической решетки [1]: превращение графита в алмаз, процессов, происходящих при ударе метеорита о корпус космического корабля или при сбросе плазмы на стенку термоядерного реактора. Исследуются процессы, информацию о которых нужно знать для изготовления техники нового поколения. Проблема в том, что новые изделия работают в экстремальных, ранее недостижимых условиях, а поведение материалов в этих условиях неизвестно.

Для реализации рентгеновского дифракционного эксперимента с пикосекундным временным разрешением на канале синхротронного излучения (СИ) № 8 ВЭПП-4 установлены станции «Детонация» и «Плазма». Генерация СИ осуществляется 7-ми полюсной змейкой с полем 1,3 Т. Энергия электронов 4,1 ГэВ, длительность банча 73 пс. Такие параметры генерации СИ позволяют исследовать процессы с высоким, пикосекундным временным разрешением. Для канала разработана рентгеновская оптика на базе 150000 элементов с использованием LIGA технологии, которая позволяет фокусировать пучок СИ до микронных размеров. Регистрация дифрактограмм осуществляется детектором DIMEX [2] с экспозицией 73 пс.

[1] Базаров Ю.Б., Губачев В.А., и др. Невозмущающие методы диагностики быстропротекающих процессов/ Под ред. А.Л.Михайлова. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2015. – 322 с.

[2] Shekhtman, L.I., Aulchenko, V.M., et al/ Journal of Instrumentation, 2012, 7 (3), C03021.

СТАНЦИЯ СТРУКТУРНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Тригуб А.Л., Велигжанин А.А., Зубавичус Я.В., Чернышов А.А.
НИЦ "Курчатовский институт"

Станция Структурного материаловедения СТМ расположена на канале 1.3б Курчатовского источника синхротронного излучения и ориентирована на исследование структурных особенностей функциональных материалов с характерными размерами от единиц ангстрем до десятков нанометров. Широкий диапазон размеров структурных особенностей, изучаемых на станции СТМ, определяется реализованными методами: методы рентгеновской спектроскопии поглощения (EXAFS, XANES), дифракционные методы (SAXS, XRD). EXAFS позволяет реконструировать локальную атомную структуру около поглощающего атома, XANES спектр содержит информацию о геометрии атомного окружения и об электронной структуре поглощающего атома Метод порошковой рентгеновской дифракции XRPD позволяет проводить фазовый анализ, а также уточнение кристаллических структур по методу Ритвельда. Метод малоуглового рассеяния служит для определения размеров и форм наночастиц. Помимо наличия ряда структурных методов на станции имеется оборудование для проведения in-situ экспериментов, т.е. создание на образце температур от 5K до 1000oC, специализированных газовых сред. Регистрация рентгеновских спектров и дифрактограмм совместно с варьированием температуры и параметров газовой среды в камере образца позволяют прослеживать структурные изменения в образце и изменения электронной структуры поглощающих атомов.

Благодаря широким возможностям станции, на ней решается целый ряд структурных задач по исследованию катализаторов, функциональных наноматериалов, перспективных магнитных материалов, металлоорганических комплексов и других объектов.

НАНОЧАСТИЦЫ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА В SiO_2-МАТРИЦЕ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Хамова Т.В.[1], Копица Г.П.[1,2], Шилова О.А.[1], Соколов А.Е.[2], Баранчиков А.Е.[3]

[1] Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург

[2] НИЦ КИ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ КИ, Гатчина

[3] Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

e-mail: kopitsa@lns.pnpi.spb.ru

В настоящей работе методами МУРР и МУРПН, порошковой дифракции нейтронов, СЭМ и низкотемпературной адсорбции азота было проведено исследование структурных и магнитных свойств ксерогелей $CoFe_2O_4$ в матрице SiO_2. Образцы получали золь-гель методом на основе золя тетраэтоксисилана (ТЭОС), гидролизованного в водно-спиртовой кислой среде в присутствии модифицирующих неорганических веществ $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ и $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$. В основе приготовления кремнезоля лежала двухстадийная методика кислотного гидролиза ТЭОС. На 1-й стадии гидролиза исходные компоненты $Si(OEt)_4$, EtOH, H_2O и HNO_3 последовательно смешивались при мольном соотношении 1:1,6:2,5:0,001, соответственно. Полученный кремнезоль 1-й стадии гидролиза помещался в закрытый сосуд и выдерживался при 5°C в течение суток. Приготовление кремнезоля, содержащего модифицирующие компоненты (нитраты железа и кобальта) – 2-я стадия гидролиза, осуществлялось следующим образом. Сначала растворялись $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ и $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ в дистиллированной воде. Полученный раствор при интенсивном перемешивании добавлялся к кремнезолю 1-й стадии гидролиза. В результате при комнатной температуре получался прозрачный модифицированный кремнезоль темно-бордового цвета. Концентрация модифицирующих веществ выбиралась из расчета получения материала следующего состава $23CoO \cdot 31Fe_2O_3 \cdot 46SiO_2$ масс.%.

Модифицированный кремнезоль старился в закрытом сосуде до перехода в гель при комнатной температуре. Полученный гель высушивался при 100°C на воздухе до образования ксерогеля. Ксерогель подвергался термообработке при 800°C в течение 2 часов на воздухе. В результате получался образец феррита кобальта в матрице SiO_2.

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

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

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ: СОВРЕМЕННЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

Цыбуля С.В., Яценко Д.А., Пахарукова В.П.

Новосибирский государственный университет

Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН

e-mail: sergey.tsybulya@yandex.ru

Высокодисперсные системы представляют собой обширный класс интересных для фундаментальных исследований и практически важных объектов. Фундаментальные аспекты проблемы связаны с изучением физико-химических свойств таких систем в зависимости от размеров, формы наночастиц, способов их агрегирования (наноструктурирования); прикладные задачи определяются их применением в качестве катализаторов, адсорбентов, магнитных материалов, добавок для упрочнения сплавов, полимеров, улучшения характеристик защитных покрытий, средств доставки лекарственных препаратов и во многих других приложениях. Между тем, высокодисперсные системы являются объектами особой сложности для рентгеноструктурного анализа (РСА) из-за размытости и низкой информативности дифракционных картин. В задачи РСА, помимо уточнения атомной структуры наночастиц, входит определение наноструктурных параметров, характеризующих форму частиц, распределение частиц по размерам и способы их стыковки при образовании когерентных наноструктур. Требуются специальные подходы и методики, активно развиваемые, в том числе и нами, в последнее десятилетие. В настоящее время разработаны эффективные алгоритмы и создано программное обеспечение для расчета дифракционных картин как от ансамблей хаотически разориентированных наночастиц, так и от упорядоченных 1D, 2D и 3D наноструктур [1,2]. В докладе приводится обзор современного состояния РСА нанокристаллов и рассматриваются многочисленные примеры исследования структуры высокодисперсных систем – металлических наночастиц, оксидов, гидроксидов, углеродных материалов. Анализируются особенности дифракции объектов с размерами ОКР менее 5 нм. Предложены оригинальные модели 3D наноструктур, характерных для метастабильных форм оксида алюминия, и с использованием метода DFA (Debay Function Analysis), рассчитаны соответствующие им дифракционные картины.

Работа поддержана грантом РНФ № 14-23-00037.

[1] Tsybulya S.V. Cherepanova S.V., Kryukova G.N./ In Diffraction analysis of the microstructure of materials (Mittemejer E.J., Scardi P. Eds.), Springer-Verlag, Berlin. 2004, p.93-123.

[2] Яценко Д.А., Цыбуля С.В. //Известия РАН. Серия физическая, 2012, т.76, с. 433-436.

СТРУКТУРНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ

Чернышев В.В.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail:vladimir@struct.chem.msu.ru

Разработка и создание новых перспективных материалов представляют собой сложный многоуровневый процесс. Для любого твердофазного материала, обладающего пространственным упорядочением, важным и необходимым этапом этого процесса является установление его трехмерной структуры. Знание структуры вещества на атомном уровне позволяет исследователю находить зависимости его свойств от особенностей структуры, что, в свою очередь, делает возможным «тонкую» настройку этих свойств, меняя условия синтеза и последующих модификаций. К хорошо известным примерам таких материалов относят цеолиты, кристаллические алюмосиликаты, которые благодаря своим уникальным структурным, кислотно-основным и окислительно-восстановительным свойствам широко используются как гетерогенные катализаторы в нефтехимии, нефтепереработке и органическом катализе. В настоящее время усилия исследователей направлены на изучение структуры металлсодержащих цеолитов, эффективность применения которых зависит от знания природы активных центров и мест их локализации в структуре цеолита.

Другим примером являются металл-органические координационные полимеры, или металл-органические каркасы (MOF). Разнообразные свойства MOF, прежде всего каталитические и адсорбционные, могут регулироваться за счет присутствия катионов/кластеров металлов в неорганических строительных блоках, наличием функциональных групп на внутренней поверхности полостей и каналов, а также за счет присутствия в порах функциональных «гостевых» молекул. Как правило, материалы на основе металл-органических каркасов обладают хорошей степенью кристалличности, что позволяет определять новые кристаллические структуры методами порошковой дифракции даже из многофазных образцов и отслеживать динамику их трансформаций в зависимости от времени и условий окружающей среды [1].

Интерметаллические соединения (ИМС) редкоземельных элементов, демонстрирующие разнообразные уникальные физические свойства, обусловленные корреляциями между сильно локализованными магнитными моментами атомов f-элементов и электронами зоны проводимости, находят свое применение в электронике, запоминающих устройствах, спинтронике и других областях техники. Для подобных соединений не всегда удается отобрать монокристалл нужного состава для определения новой структуры, и здесь помогает порошковая дифракция. На дифрактограмме удается выделить пики, относящиеся к новой кристаллической фазе, и уже целенаправленно менять условия синтеза, чтобы увеличить ее содержание в конечном продукте. А это, в свою очередь, нередко приводит к полному определению новой структуры и помощью порошковой дифрактограммы, и в дальнейшем позволяет отслеживать трансформации структуры с понижением или повышением температуры.

В настоящей работе будут представлены результаты исследования образцов вышеперечисленных материалов методами порошковой дифракции с использованием как лабораторных дифрактометров, так и синхротронных установок Курчатовского института и Европейского центра синхротронного излучения (ESRF). Также будут представлены новые кристаллические структуры β-замещенных порфиринов и новых полиморфов многофункциоанльного стероидного гормона дегидроэпиандростерона [2], определенные порошковыми методами.

Настоящее исследование поддержано министерством образования и науки РФ (грант RFMEFI61616X0069).

[1] Isaeva V.I, Belyaeva E.V. et al. // Cryst. Growth Des., 2013, Vol. 13, 5305 - 5315.

[2] Chernyshev V.V, Morozov Y.N. et al. // Cryst. Growth Des., 2016, Vol. 16, 1088 - 1095.

РЕНТГЕНОВСКИЕ ТОМОГРАФИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ: ОПИСАНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ КАК ОСНОВА РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ПРИ ПОЛИХРОМАТИЧЕСКОМ СКАНИРОВАНИИ И ВО ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ СХЕМАХ

Чукалина М.В.[1], Прун В.Е.[2], Бузмаков А.В.[1], Николаев Д.П.[3], Ингачева А.С.[1], Вацюк А.В.[2], Золотов Д.А.[1], Соколов В.В.[3], Асадчиков В.Е.[1]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] Московский физико-технический институт
[3] Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН
e-mail: chukalinamarina@mail.ru

В докладе представлен обзор существующих в мире подходов к решению задачи компьютерной томографии в условиях полихроматического зондирования, приведена мотивация выбранного нами подхода и на его основе предложен алгоритм реконструкции. Обратная задача, возникающая при полихроматическом зондировании и во флуоресцентной схеме, принципиально отличается от задачи КТ, поскольку является нелинейной. Поэлементное описание многокомпонентных исследуемых систем позволило нам построить на базе алгебраического метода итерационный алгоритм, суть которого минимизация L2 нормы. В такой постановке выписано аналитическое выражение для одной итерации. Данный инструмент позволил определить пределы применимости метода. Результаты математического моделирования обсуждаются в деталях. В заключение доклада приводится обоснование необходимости в дополнение к восстановленному изображению рассчитывать матрицу Якоби для задачи рентгеновской флуоресцентной томографии [1]. На основе Якобиана рассчитывается изображение дополнительное к восстановленному - своего рода карта степени надежности результатов реконструкции. Связано это с тем фактом, что рождаемая флуоресценция может быть поглощена на пути к детектору и тогда метод реконструкции либо продемонстрирует отсутствие источника флуоресценции, либо поместит случайную величину яркости источника.

Работа выполняется при поддержке 16-32-00498 мол_а. Обсуждение источников возникающих ошибок

проводилось на встречах в рамках программы EXTREMA COST Action MP1207.

[1] Nikolaev D., Chukalina M// Proc. SPIE 9445, Seventh International Conference on Machine Vision (ICMV 2014), 2015, 9445, p. 94451M.

СТАНЦИЯ «НАНОФЭС» НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ: СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Чумаков Р.Г., Меньшиков К.А., Лебедев А.М., Свечников Н.Ю., Станкевич В.Г., Назин В.Г., Цетлин М.Б.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: ratibor.chumakov@gmail.com

В настоящее время вводится в строй станция «НаноФЭС» на Курчатовском источнике синхротронного излучения, предназначенная для реализации методик фотоэлектронной спектроскопии (PES), в том числе с угловым разрешением (ARPES), SPM микроскопии и спектроскопии рентгеновского поглощения.

Станция предназначена как для фундаментальных исследований по физике твердого тела и физики поверхности, так и для отработки технологических операций в процессе решения задач микроэлектроники, поверхностного катализа и ряда других областей науки, определяющих современный научно-технический прогресс.

Станция использует излучение поворотного магнита канала вывода 6.5 и монохроматор с плоскими дифракционными решетками на спектральный диапазон 25-1500 эВ. Излучение из монохроматора фокусируется на исследуемый образец в спектрометре, оборудованный полусферическим энергоанализатором PHOIBOS 225 с энергетическим разрешением 1 мэВ и угловым разрешением 0.1°. Температуру образцов во время измерений можно изменять от 10К до 550К. Станция снабжена набором дополнительного оборудования для in-situ подготовки поверхности, ориентации исследуемых образцов (в том числе монокристаллических) и напыления монослойных и субмонослойных пленок, а также AFM и STM микроскопом для in-situ исследований топографии и поверхностной электронной структуры образцов. Во всем объеме экспериментальной станции сверхвысокий вакуум не хуже, чем $5 \cdot 10^{-10}$ мбар.

В докладе представлены оптическая схема, технические характеристики, первые спектры и обсуждаются перспективы развития станции.

ТОНКИЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Штрикер А., Гертляйн Ф., Михаельзен К., Гайдорн У., Визманн И.

Incoatec GmbH

E-mail: administration@incoatec.de

В этом докладе мы будем давать обзор о новых разработках многослойной оптики для дифрактометрии в лаборатории, а также для синхротронного применения. Мы будем объяснять процесс изготовления оптики, суммируя различные типы оптики и давая некоторые примеры типичных применений, которые извлекают выгоду из новых возможностей, особенно в сочетании с современными микрофокусными рентгеновскими источниками.

Для синхротронов мы разработали покрытия длиной до 150 см для луча кондиционирования и мульти-полосую многослойную оптику для станции источника синхротронного излучения. А также 2-тусклую многослойную оптику, так называемую MONTEL оптику, для применения неэластичного рассеяния. Мы будем показывать первые результаты 50 см в поперечном направлении многослойной градиентной оптики, разработанной для специальной мини-синхротроной и мульти-полосой многослойной оптики с оптимизированным покрытием для различных энергических пучков в диапазоне от 10 до 45 кэВ, которые используются для томографии пучка в Swiss Light Source.

В домашней лаборатории в современных рентгеновских дифрактометрах широко используется в качестве одного из важнейших компонентов многослойная Монтел оптика. Эта оптика состоит из изогнутых подложек с допусками формы ниже 100 нм, на которых осаждаются мультислоя, толщиной от одного слоя и до нескольких сотен пар слоев в нанометровом диапазоне. Мультислоя спроектированы с боковыми градиентами толщиной в пределах ± 1% отклонения от идеальной формы. Очень малые допуски формы ниже 100 нм и погрешность 5 угловых секунд требуются для многослойных зеркал, чтобы обеспечить превосходную плотность потока более 4 x 1011 фотонов / S / мм2 в сочетании с очень высокой яркостью микрофокусных рентгеновских источников. Для рентгеновской аналитики важными параметрами пучка являются: монохроматичность, поток, яркость и дивергенция. Они демонстрируют качество комбинации источников рентгеновского излучения, подходящих к отобранной многослой оптике.

Мы представим результаты комбинации наших исходных микрофокусных трубочек IμS с двумерными пучками формирования многослойной оптики. Эта комбинация в настоящее время разработана для различных длин волн, таких как Cr, Co, Cu, Mo, и Ag. Они формируют сфокусированный или коллимированный луч с очень высокой плотностью потока, а также адекватной дивергенции непосредственно в месте расположения образца. Оптика также доступна, которая сосредоточена в одном измерении и коллимирует в другое. Это обеспечивает линейный образный профиль луча. Некоторые применения, реализованные с IμS являются: текстуры, анализ напряжений, микродифракция и монокристальная дифракция. Это лишь некоторые названные из них.

К ИСТОРИИ МАЛОУГЛОВЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ БИОПОЛИМЕРОВ В РОССИИ

Штыкова Э.В., Фейгин Л.А.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: feigin@ns.crys.ras.ru

В докладе будет рассказано об очень важном периоде становления структурных исследований биополимеров методом рентгеновского малоуглового рассеяния в России, начиная со второй половины прошлого столетия и по наше время. В 60-тых годах в Институте кристаллографии АН СССР, в лаборатории по изучению структуры белков, организованной академиком Б.К. Вайнштейном, была создана группа, которая во многом определила развитие метода не только у нас в стране, но и за рубежом.

В то время важную роль в становлении метода, в его необходимости сыграла молекулярная биология и, прежде всего, возможность получения высокоочищенных препаратов белков, рибосом, вирусов. Именно тогда в Институте кристаллографии удалось показать на модельных расчетах, что интенсивность малоуглового рассеяния сильно зависит не только от размера частицы и ее формы, но и от внутренней структуры. По данным малоуглового рассеяния были построены модели ряда белков, рибосом и нескольких бактериальных вирусов – бактериофагов. Одновременно продолжались экспериментальные исследования биополимеров, а в начале 80-х был построен первый малоугловой рентгеновский дифрактометр с одномерным позиционно-чувствительным детектором. В 1986-1987 гг. в СССР и США вышла в свет монография Л.А. Фейгина и Д.И. Свергуна по рентгеновскому и нейтронному малоугловому рассеянию, которая до сего времени широко используется исследователями в данной области.

Метод малоуглового рассеяния (МУР) зародился в первой половине XX века и связан с именами крупных ученых А. Гинье, П. Дебай, О. Кратки и других классиков дифракционной физики. Российская школа малоуглового рассеяния также богата именами, которые сейчас известны во всем мире. Талантливые личности, они создали особую, творческую атмосферу в различных лабораториях малоуглового рассеяния нашей страны. Их судьба сложилась по-разному, но их вклад стал тем фундаментом, на котором стоит и успешно развивается метод. История МУР - это история людей, вложивших в него свои знания, способности, труд.

ИЗМЕНЕНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ОРИЕНТАЦИОННОМ ПЕРЕХОДЕ В ФЕРИМАГНЕТИКЕ TM_2FE_{17}

Шушунов М.Н.[1], Глазков В.П.[1], Воронин В.И.[2], Валиев Э.З.[2], Кучин А.Г.[2], Платонов С.П.[2]
[1] НИЦ Курчатовский Институт
[2] ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail:viggenin@yandex.ru

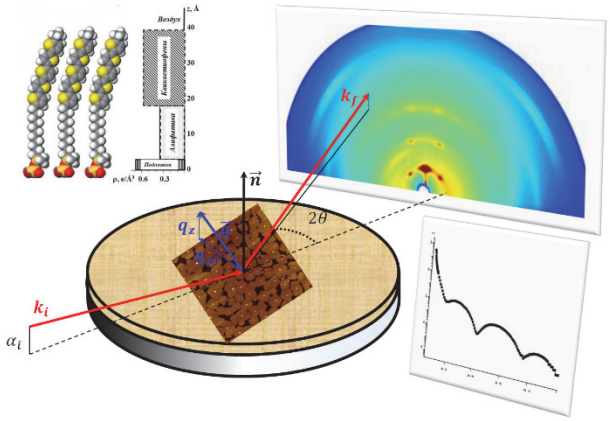
Экспериментально и теоретически исследовано изменение доменной структуры при ориентационных переходах в различных классах магнетиков (сильных и слабых ферромагнетиках, ферримагнетиках) и показано, что при таких типах переходов должна происходить зависящая от магнитной структуры фрагментация или огрубление структуры доменов. На примере ферримагнетика Tm2Fe17 в котором реализуется ориентационный переход типа «легкая ось – легкая плоскость», обусловленный упорядочением редкоземельной решетки с помощью нейтронного спектрометра СТОИК проведено изучение ультрамалоуглового рассеяния при изменении температуры и магнитного поля. Установлено уширение кривой ультрамалоуглового рассеяния при фазовом переходе, свидетельствующее об уменьшении размера доменов при увеличении магнитного поля, доказывающее магнитный характер рассеяния. Определены размеры доменов. Полученные результаты показывают возможность использования ультрамалоуглового рассеяния как для диагностики, так и для выяснения природы ориентационных переходов в ферромагнетиках.

Работа частично выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Поток», № 01201463334) и поддержки РНФ (проект No. 15-12-10015).

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ ТОНКИХ ПЛЕНОК И МОНОСЛОЕВ: РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ, РАССЕЯНИЕ В СКОЛЬЗЯЩИХ УГЛАХ ОТРАЖЕНИЯ [1]

Щербина М.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: max-shcherbina@yandex.ru

Модификация поверхности тех или иных материалов для придания им особых свойств путем нанесения различных тонкопленочных покрытий является важнейшим приемом современной технологии. Свойства таких покрытий, их эксплуатационные характеристики определяются в первую очередь структурой нанесенных пленок.



В обзоре представлены современные экспериментальные методы исследования тонких наноразмерных пленок различной природы на основе эффекта полного отражения рентгеновского излучения от поверхности: рентгеновская рефлектометрия, рассеяние в скользящих углах отражения, стоячие рентгеновские волны. На примере различных макромолекулярных систем, обладающих (полу)проводниковыми свойствами и перспективных в качестве тонкослойных транзисторов, светоизлучающих диодов, фотовольтаических ячеек, показаны возможности метода стоячих рентгеновских волн, рентгеновской рефлектометрии и рассеяния при скользящем падении пучка для понимания процессов структурообразования в тонких пленках и повышения эффективности работы элементов органической электроники.

1 Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (номер гранта 15-03-05919).

МУЛЬТИПОПУЛЯЦИОННЫЙ ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ИЗ ДАННЫХ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ В ПРЯМОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Якимов И.С., Залога А.Н., Дубинин П.С.
ФГАОУ «Сибирский федеральный университет»
e-mail: i-s-yakimov@yandex.ru

Методы прямого пространства просты в применении, могут использовать известные структурные фрагменты и определять структуру в веществах с примесями. Основным является метод имитации отжига (программы FOX, DASH, TOPAS, EXPO), реже применяют генетические алгоритмы - ГА (EAGER, GEST, MAUD). Общей проблемой методов является ухудшение сходимости из-за стагнации в многочисленных локальных минимумах гиперповерхности R-фактора [1]. Известны попытки улучшения сходимости за счет параллельных вычислений на кластерах. Нами предложен мультипопуляционный ГА (МПГА), основанный на коэволюции независимых однопопуляционных ГА, процессирующих на разных ядрах многоядерных ПК или кластеров [2]. Приводятся результаты определения тестовых и неизвестных структур. Обсуждаются механизм эволюционной сходимости МПГА и роль локального уточнения по методу Ритвельда. Доклад иллюстрируется анимацией сходимости атомов в популяциях структурных моделей к их истинным позициям в структуре и графиками сходимости R-фактора. На рис. 1 показан пример графика сходимости МПГА тестовой структуры соединения Ca2Al3O6F [3] (25 степеней свободы атомных координат), найденной на 91-м поколении эволюции.

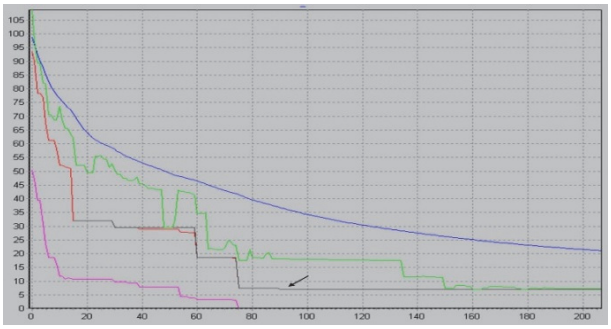


Рис.1. График сходимости МПГА: ось абсцисс - номер поколения эволюции, ось ординат – профильный R-фактор; красная линия - значения функции пригодности лучшей структурной модели: R-фактор + штраф за ее нефизичность (фиолетовая линия); черная – пригодность после уточнения по Ритвельду; зеленая – пригодность худшей из лучших моделей в популяциях.

[1] K. Shankland et al // J. Appl. Cryst., 2010, N43, pp 401–406.

[2] A.N. Zaloga, I.S. Yakimov et al // Crystal Research and Technology, 2015,V. 50, N9-10, pp 724–728.

[3] Zhiguo Xia et al // Phys. Chem. Chem. Phys., 2014, N16, pp 5952-5957.

ИЗУЧЕНИЕ АТОМНО-ВАКАНСИОННОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В СПЛАВАХ Fe-Ga ПРИ ПОМОЩИ ПОЗИТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Акмалова Ю.А.[1], Дубов Л.Ю.[1,2], Штоцкий Ю.В.[1,2], Головин И.С.[3], Палачева В.В.[3]

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

[2] *НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ»*

[3] *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*

e-mail: akmalovayuliya@gmail.com

Высокая магнитострикция и механическая прочность сплавов Fe-xGa (Galfenols) делает их перспективным материалом для изготовления датчиков и исполнительных устройств. Магнитные и механические свойства сплавов Fe-Ga зависят от фазового состояния, концентрации галлия и дефектной структуры материала. Зависимость коэффициента магнитострикции от содержания галлия существенно немонотонная и имеет два максимума: вблизи x=19 ат.% и x=27 ат.% галлия. Также нет и однозначной корреляции между фазовой структурой и магнитострикционными свойствами. Если упорядочение ОЦК структуры в Fe-19Ga с образованием фазы D03 приводит к резкому снижению коэффициента магнитострикции, то Fe-27Ga показывает максимальную магнитострикцию именно в фазе D03 [1].

В нашей работе мы изучали поведение дефектов кристаллической решетки методом позитронной аннигиляционной спектроскопии в трех сплавах: Fe-20.5Ga (вблизи первого максимума магнитострикции), Fe-22.4Ga (локальный минимум) и Fe-27Ga (второй максимум). Время жизни позитронов (рис.1) позволяет следить за концентрацией вакансий, которая меняется при изменении фазового состава.

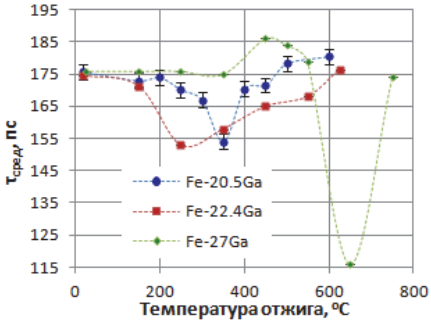


Рис.1. Зависимость среднего времени жизни позитронов от температуры отжига.

Обнаружено принципиально разное поведение вакансий при отжиге в сплавах с содержанием Ga меньше и больше, чем в стехиометрическом составе Fe3Ga. В сплавах с x<25 образовывалась бездефектная D03-фаза, а при x>25 D03 характеризовалась высокой концентрацией структурных вакансий.

[1] Dubov L.Yu., Shtotsky Yu.V., et al. // Materials Letters, 2016, V. 171, pp. 46-49.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ СИНХРОТРОННЫЙ СПЕКТРОМЕТР НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Аксенов В.Л.[1,2], Тютюнников С.И.[2], Шаляпин В.Н.[2], Беляев А.Д.[3], Артемьев А.Н[3], Артемьев Н.А.[4], Кириллов Б.Ф.[3], Демкив А.А.[3], Князев Г.А.[3]

[1] *Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»*

[2] *Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ)*

[3] *НИЦ "Курчатовский институт"*

[4] *Advanced Light Source, Lawrence Berkeley National Lab, Berkeley, CA 94720, USA*

e-mail: anatoly_belyaev@mail/ru

I. EXAFS В ДИСПЕРСИОННОЙ МОДЕ

Описывается усовершенствованная рентгеновская оптика, система регистрации и методика измерений многофункционального синхротронного спектрометра в EXAFS —дисперсионной моде. Приводятся измерения энергетического разрешения спектрометра. Проанализированы достоинства и недостатки традиционных и дисперсионной схем EXAFS спектрометров. Приведены примеры EXAFS спектров, измеренных в дисперсионной моде.

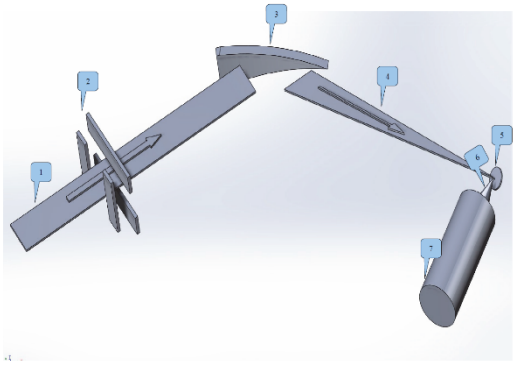
II. РЕНТГЕНФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ МИКРОАНАЛИЗ

Физический пуск энергодисперсионного EXAFS спектрометра, созданного совместными усилиями Объединенного института ядерных исследований, Белорусского государственного университета, НИЦ «Курчатовский институт» и Института кристаллографии РАН был произведен в НИЦ КИ в 2008 году на накопителе электронов Сибирь-2. Спектрометр предназначен для исследований в физике конденсированных сред методами EXAFS-спетроскопии.

В работе представлены результаты дооборудования этого спектрометра для исследований в области рентгенофлуоресцентного микроэлементного анализа. Даны характеристики рентгенооптической фокусирующей системы спектрометра. Дооборудованный спектрометр позволяет проводить исследования микроэлементного состава образцов с локальностью по площади образца порядка 100 -200 мкм. Основная гармоника монохроматизированного излучения обеспечивает диапазон возбуждения К краев поглощения исследуемых элементов от кальция — Ca^{20} до ниобия Nb^{41}. Использование третьей гармоники излучения расширяет диапазон до олова Sn^{50}. При использовании L краев поглощения исследуемых элементов диапазон простирается до конца периодической системы.

Легко изменяемая энергетическая ширина монохроматизированного пучка, использующегося для возбуждения флуоресценции, позволяет варьировать условия эксперимента в случае анализа образцов сложного состава.

Приведенные примеры исследований включают образцы меди, свинца и нанопленок меди и золота.



Рентгено оптическая схема спектрометра для исследований микроэлементного состава. 1 — белый пучок СИ, 2 — щели, 3 - изогнутый кристалл — монохроматор, 4 — сфокусированный полихроматический пучок, 5 — исследуемый образец, 6 - конус флуоресцентного излучения образца, 7 — полупроводниковый детектор.

III. ДИФРАКЦИЯ В ГЕОМЕТРИИ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА

Описывается рентгенооптическая схема и аппаратура многофункционального синхротронного спектрометра, доработанные для исследований дифракции в геометрии Дебая-Шерера. Проведен анализ аппаратной функции спектрометра. Даны примеры картин дифракции на поликристаллах с регистрацией как в прямую, так и в обратную полусферы.

[1] Tyutyunnikov S.I., Shalyapin V.N., Aksenov V.L., Artem'ev A.N., Zabelin A.V., Kirillov B.F., Koval'chuk M.V., Maevskii A.G., Belyaev A.D., Porokhova A., Rezvov V.A., «Physical Startup of Energy Dispersive EXAFS Spectrometer at Kurchatov Center of Synchrotron Radiation and Nanotechnologies», Physics of Particles and Nuclei Letters, 2009, Vol. 6, No. 6, pp. 483–487

ИССЛЕДОВАНИЕ [Fe/Cr]*n СТРУКТУР МЕТОДОМ ЯДЕРНО-РЕЗОНАНСНОГО ОТРАЖЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕССБАУЭРОВСКОГО СИНХРОТРОННОГО ИСТОЧНИКА

Андреева М.А.[1], Баулин Р.А.[1], Чумаков А.И.[2], Смирнов Г.В.[3], Руффер Р.[2], Бабанов Ю.А.[4], Девятериков Д.И.[4], Голобородский Б.Ю.[4], Пономарев Д.А.[4], Ромашев Л.Н.[4], Устинов В.В.[4]

[1]МГУ им. Ломоносова

[2] ESRF

[3]НИЦ «Курчатовский институт»

[4]ИФМ РАН им. М.Н. Михеева

e-mail: romanbaulin17@gmail.com

Кластерно-слоистые многослойные структуры [Fe/Cr] проявляют множество интересных магнитных свойств [1].

Ядерно-резонансная рефлектометрия является эффективным методом исследования магнитного упорядочения в многослойных структурах [2]. На станции ID18 на ESRF с использованием ядерного монохроматора [3] был исследован многослойный образец $[^{57}Fe(8Å)/Cr(10.5Å)]_{30}$ [4]

На кривых ядерно-резонансной рефлектометрии (Рис. 1)., измеренных как интеграл по мессбауэровскому спектру отражения (подробнее в [5]), присутствуют брэгговские максимумы полуцелого порядка, свидетельствующие об удвоении магнитного периода.

При приложении небольшого внешнего поля $\mathbf{H}_{ext}$ (0.15 T) антиферромагнитно упорядоченные в соседних слоях $\mathbf{B}_{hf}^{(i)}$ выстраиваются перпендикулярное полю, что подтверждается отсутствием «магнитного» максимума на кривых ядерно-резонансной рефлектометрии, когда $\mathbf{H}_{ext}$ || пучку СИ, и его наличием, когда $\mathbf{H}_{ext}$ ⊥ пучку СИ. При дальнейшем увеличении $\mathbf{H}_{ext}$ до 3 T переход в ферромагнитную структуру, выстроенную вдоль $\mathbf{H}_{ext}$, происходит не полностью, «магнитный» максимум при $\mathbf{H}_{ext}$ ⊥ пучку СИ еще сохраняется

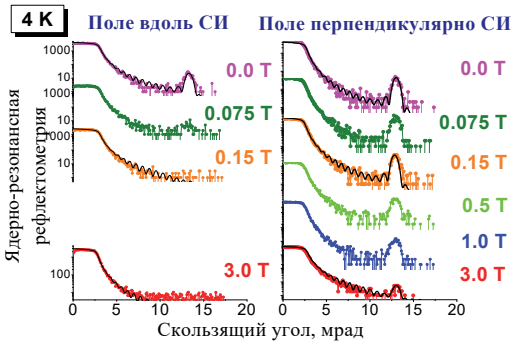


Рис. 1. Кривые ядерно-резонансной рефлектометрии при разных величинах и направлениях $\boldsymbol{H}_{ext}$.

[1] Drovosekov A.B., Kreines N.M., et al. // JETP Letters, 2008, том 88, с. 118-122.

[2] Andreeva M., Gupta A., et al. // Phys. Rev B, v.92. 2015, p.134403-1-12.

[3] Potapkin V., Chumakov A., et al. // J. Synchrotron Rad., 2012, v.19, p.559-569.

[4] http://ftp.esrf.fr/pub/UserReports/55167_A.pdf

[5] Баулин Р.А., Андреева М. А. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.. 2 2016, 40-44.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА КОРРЕКЦИИ УГЛОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ РАДИОМЕТРОВ ЭНЕРЕГТИЧЕСКОЙ ЯРКОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Аневский С.И.[1], Минаева О.А.[1], Минаев Р.В.[1], Лебедев А.М.[2], Станкевич В.Г.[2]
[1] *ФГУП ВНИИОФИ*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
lebedev.alex.m@gmail.com

Применение телескопа с ПЗС матрицей для диагностики электронного сгустка накопительного кольца, показало существенное влияние на результаты измерений угловой неоднородности чувствительности компаратора энергетической яркости. Использование метрологических каналов на источниках синхротронного излучения «Сибирь-1» (НИЦ Курчатовский институт) и MLS позволило разработать высокоточный метод угловой коррекции чувствительности радиометров энергетической яркости, включающий телескопы и ПЗС матрицы. Для угловой коррекции используется гауссово распределение спектральной плотности энергетической яркости синхротронного излучения по излучающей области. Фиксация изображения электронного пучка позволяет присвоить каждому пикселю угловые координаты и определить абсолютную спектральную чувствительность пикселя и угловое разрешение телескопа. Полученное угловое распределение чувствительности компаратора спектральной плотности энергетической яркости позволяет ввести поправочные коэффициенты чувствительности каждого пикселя, для коррекции результирующей чувствительности радиометра-телескопа в пределах 0,1%.

РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФРАКЦИОННАЯ ЛИНЗА С БОЛЬШОЙ АПЕРТУРОЙ

Артемьев Н.А.[1], Артемьев А.Н.[2]
[1] *Advanced Light Source, Lawrence Berkeley National Laboratory,CA 94720, USA*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
e-mail: alartemev@mail.ru

В оптике видимого света способом увеличения светосилы является увеличение апертуры линзы (объектива). Ярким примером могут быть огромные зеркала оптических телескопов. К сожалению, такой способ увеличения светосилы не пригоден для излучения рентгеновского диапазона. Существенным обстоятельством является очень малая величина показателя преломления рентгеновского излучения во всех существующих материалах. Это обуславливает очень малые углы преломления излучения в рентгеновских рефракционных линзах. Составные рентгеновские рефракционные линзы имеют при фокусных расстояниях около одного метра очень малые апертуры – менее одного миллиметра [1].

Предлагаемое устройство состоит из нескольких одинаковых рентгеновских рефракционных линз [2]. На рисунке для простоты показано только четыре линзы. Все эти линзы установлены на равном расстоянии от изображаемого объекта так, чтобы главные оптические оси каждой из них проходили через точку, находящуюся примерно в центре объекта. Каждая из этих линз формирует свое отдельное изображение на регистрирующем экране, расположенном на расстоянии, определяющем желаемое увеличение объекта. После завершения экспозиции отдельные цифровые изображения объекта математически совмещаются друг с другом. Устройство (мультилинза) состоит из набора слоев, на каждом из которых выполнена матрица из одиночных линз. На каждом следующем слое расстояние между элементами матрицы увеличивается так, чтобы, будучи собранными в составную мультилинзу, все элементы матрицы Lik оказывались на одной [своей] оптической оси, проходящей через центр изображаемого объекта. Сбор света мультилинзой в n2 раз выше, чем сбор света в традиционной составной рефракционной линзе. Здесь – n - размерность квадратной матрицы элементарных линз на одном слое.

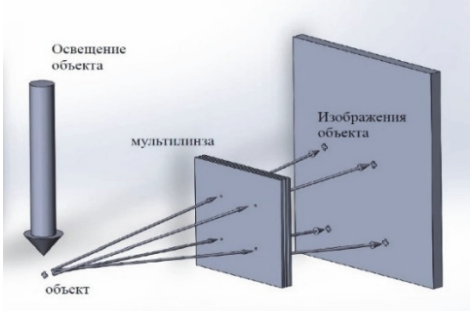


Схема получения изображения с помощью составной матричной линзы (мультилинзы).

[1] C.G. Schroer, B. Benner, T.F., et al. // Rev. Sci. Instrum., 2002, 73, N.3, p.1640-1642

[2] A. N. Artemev, N. A. Artemev, et al. //, INSTRUMENTS AND EXPERIMENTAL TECHNIQUES, Vol. 50, No. 4, 2007

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО САПФИРА В РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКЕ

Асадчиков В.Е.[1], Алексеев П.[2,3], Бессас Д.[4], Буташин А.В.[1], Бузмаков А.В.[1], Вилле Г. Х.[3], Данилевский А.[5], Дерябин А.Н.[1], Джафари А.[2,4,6], Каневский В.М.[1], Муслимов А.Э.[1], Прохоров И.А.[7], Рощин Б.С.[1], Сесилия А.[8], Сергеев И.[3], Хартвиг Ю.[4], Херманн Р.П.[2,6,9], Чумаков А.[4]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия

[2] Центр нейтронных наук г. Юлих Институт Питера Грюнберга, Германия

[3] Немецкий электронный синхротрон DESY, Германия

[4] Европейский центр синхротронного излучения ESRF, Франция

[5] Криисталлографический институт университета г. Фрайбург, Германия

[6] Научный факультет университета г. Льеж, Бельгия

[7] ФИК РАН «Космическое материаловедение»,г. Калуга, Россия

[8] Технологический институт г. Карлсруэ, Германия

[9] Подразделение материаловедения и технологий национальной лаборатории г. Окридж, США

e-mail: ross@crys.ras.ru

Появление современных источников рентгеновского излучения, обладающих сверхвысокой яркостью и значительной когерентностью выдвигает новые требования к рентгеновской оптике. В частности, метод ядерного резонансного рассеяния требует сверхузких полос пропускания для зондирующего пучка для получения ядерных спектров с разрешением до 1 мэВ [1]. Такое значение может быть достигнуто при использовании брэгговских отражений высоких порядков. Кристаллы с кубической решеткой не дают достаточного количества отражений при энергиях выше 30 КэВ. Монокристаллический сапфир не только обеспечивает нужное количество отражений при углах, близких к нормальному падению, но и обладает существенно более высокой температурой плавления по сравнению с кремнием. Установлено, что наиболее совершенные кристаллы возможно вырастить методом Киропулоса [2]. Показано, что область с наименьшей плотностью дислокаций дает наименьшую ширину энергетического спектра отраженного излучения, что соответствует наибольшей степени монохроматизации (~1,1 мэВ). Данный кристалл протестирован на станции P01 синхротрона PETRA-III в качестве монохроматора обратного рассеяния в эксперименте по ядерной резонансной спектроскопии кристалла, содержащего изотоп олова-119. Разрешение полученных спектров составило ~1,3 мэВ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №13-02-91325.

[1] Sergyeev I., H.-C. Wille et. al. // J. Synchrotron Rad., 2011, V. 18, pp. 802-810.

[2] Asadchikov V.E., Butashin A.V. et. al. Sapphire: Struct., Tech. and Appl.. Nova Science Publ., NY, 2013, pp. 35-73.

ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗ В РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОРЯДКА РАСПОЛОЖЕНИЯ СЛОЁВ В ПЛЁНКАХ

Астафьев С.Б.[1], Щедрин Б.М.[2], Янусова Л.Г.[1]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] МГУ, ВМК

e-mail: bard@crys.ras.ru

Целью работы являлось изучение возможностей применения частотно-временного вейвлет-анализа [1] для решения обратной задачи рефлектометрии. Благодаря ряду таких особенностей, как непрерывность, интегрируемость, наличие компактного носителя и локальность как во времени, так и по частоте (в пространстве) вейвлет-преобразование (ВП) обеспечивает частотно-временное представление сигнала вместо обычного временного (или частотного, как в случае Фурье-преобразования).

Использование ВП может оказаться эффективным применительно для таких параметрических задач, как восстановление электронного профиля сложной слоистой структуры. ВП для угловой зависимости интенсивности зеркального отражения рентгеновского излучения (рефлектометрической кривой) I(qz) может быть записано в следующем виде:

$W(q_z, z) = \int I(q'_z) \cdot \psi\big(z(q'_z - q_z)\big) dq'_z$, где qz - нормальная к плёнке компонента вектора рассеяния, ψ - соответствующая базисная функция вейвлета.

Применив ВП с базисом Морле к функциям I(qz)·qz6 [2], рассчитанным для моделей (а) и (б) 2-слойных плёнок с инверсным расположением слоёв, получим двумерные распределения в пространстве координат {qz, z}, рис.1.

На данных зависимостях даже визуально можно определить не только толщины, но и порядок расположения внутренних слоёв разной плотности плёнки: чем меньше значение координаты qz, с которой начинает проявляться пик, тем ближе он расположен к границе плёнки с воздухом. Сравнивая координаты пиков на рис.1(а и б), заключаем, что ближайшим к поверхности в модели (а) является слой толщиной 23Å, а в модели (б) – 77Å, что соответствует инверсному расположению слоёв на соответствующих профилях плотности.

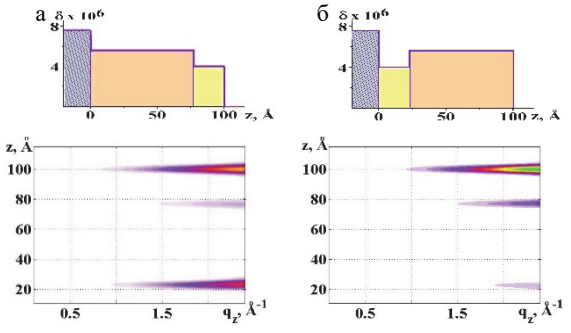


Рис.1. Профили плотности и пространственно-угловые ВП рефлектограмм для моделей двухслойных плёнок (а) и (б) с инверсным расположением слоёв.

[1] Астафьева Н.М. // УФН, 1996, т.166, с. 1145.

[2] Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Кристаллография, 2012, т. 57, с.141.

ТРЕХКРИСТАЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ. ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Аткнин И.И.[1,2], Чуховский Ф.Н.[1], Марченков Н.В.[1,2]
Благов А.Е.[1,2], Куликов А.Г.[1,2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
e-mail: Marchenkov_nv@nrcki.ru

В настоящей работе обсуждаются результаты моделирования картины дифракции для двух- и трёхкристальной геометрий дифракционного эксперимента [1,2]. Разработаны и используются новые алгоритмы расчета, которые учитывают аппаратную функцию рентгеновского дифрактометра, а именно: функцию угловой расходимости пучка, определяемой размерами щелевых коллиматоров, оптическими расстояниями между оптическими элементами экспериментальной схемы и т.п., а также спектральную функцию источника излучения (рентгеновская трубка и/или, синхротронный источник). В работе [3] было показано, что в случае бездисперсионной схемы двухкристального дифрактометра учет спектральной функции характеристического излучения $MoK_{\alpha 1,2}$ рентгеновской трубки приводит к появлению на расчётных кривых дифракционного отражения (КДО) дополнительного максимума, отвечающего $MoK_{\alpha 2}$ линии дублета характеристического излучения MoK_{α}. В общем случае дисперсионной схемы рентгеновского дифрактометра приведены результаты расчетов КДО, которые учитывают вклад дисперсии, возникающей в результате разности точных углов Брэгга монохроматора, образца и анализатора (последний - в случае трехкристальной схемы), что приводит к дополнительному уширению дифракционных максимумов. Приводится сравнение расчетных и экспериментально измеренных двухкристальных КДО для некоторых дисперсионных схем КДО (рис. 1), а именно: монохроматор кристалл Si, отражение (220), образец - кристалл Si, отражения (220), (440) и (660), соответственно, характеристическое излучение рентгеновской трубки - дублет MoK_{α}.

В докладе обсуждаются результаты расчетов 2D карт обратного пространства в окрестности узла обратной решетки (220) для монокристалла Si, соответствующие эксперименту в дисперсионной схеме трехкристальной рентгеновской дифрактометрии (ТРД), излучение рентгеновской трубки $MoK_{\alpha 1,2}$.

Для сокращения времени расчета 2D карт ТРД, требующих многократного интегрирования, были использованы такие алгоритмы расчета как метод Монте-Карло и многопоточные вычисления.

В докладе развивается теоретический подход к описанию общей картины дифракционного рассеяния рентгеновских лучей в реальных кристаллах с учетом вклада диффузного рассеяния, возникающего при наличии статических дефектов и тепловых колебаний атомов. В основе данного подхода лежит модель, предложенная в [4], в которой изложены физические основы теории диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах и наличие двух дифракционных каналов: когерентного и диффузного. В рассматриваемом случае дефекты кристаллической структуры статистически распределены по объему неравномерно так, что их средняя концентрация является функцией глубины в направлении нормали к поверхности исследуемого образца.

Суммируя вышесказанное, в докладе приводятся и анализируются результаты расчетов и экспериментов, представляющих интерес для изучения реальной структуры кристаллических материалов на основе применения методов КДО и ТРД методов рентгеновской диагностики.

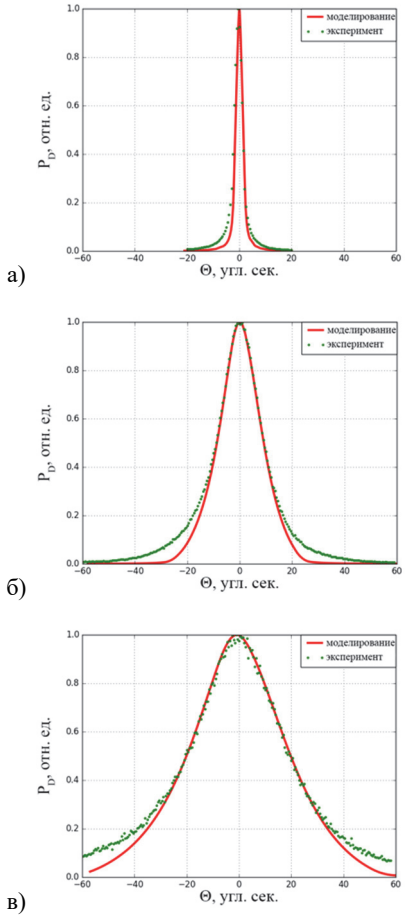


Рис.1. Двухкристальные КДО для различных пар кристаллов монохроматора (Si(220)) и образца: а) Si(220), $\theta_B = 10.6^o$; б) Si(440), $\theta_B = 21.7^o$; в) Si(660), $\theta_B = 33.7^o$. Излучение - MoKα1 (λ=0.71 Å).

[1] Bowen D.K, Tanner B.K. High resolution x-ray diffractometry and topography / London: Taylor & Francis Ltd.2005.pp. 267.

[2] Казимиров А.Ю., Ковальчук М.В. Чуховский Ф.Н. Высокоразрешающая трехкристальная рентгеновкая дифрактометрия // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 3. с 776-778.

[3] Марченков Н.В., Чуховский Ф.Н., Благов А.Е. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. с 194 – 198.

[4] Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н.// Металлофизика. 1986. Е. 8. № 3, с. 45-31.

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ КРАЕВЫЕ МОДЫ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Беляков В.А.
ИТФ им.Л.Д. Ландау РАН
e-mail: bel@landau.ac.ru

Показано, что при определенных дискретных значениях энергии холодных нейтронов существуют квазистационарные локализованные в слое периодической среды решения уравнения Шредингера (аналогчные недавно наблюдавшимся ннйтронным локализованным модам шепчущей галлереи [1]). Время жизни соответствующих состояний зависит от толщины слоя, будучи конечным для конечной толщины слоя и стремящимся к бесконечности при неограниченном ее росте как третья степень толщины. Решение проведено в рамках двуволновой динамической терии дифракции нейтронов в геометрии нормального падения пучка на слой (распространения нейтронов вдоль направления периодичности [2]). Найдены выражения для волновой функции нейтрона в слое, коэффициентов отражения и прохождния как функций энергии нейтронов пучка. Найдено, что при определенных дискретных значениях энергии амплитуда волновой функции в слое достигает резких максимумов. Соответствующие энергии оказываются вне границы области дифракционного отражения и определяют энергии нейтронных локализованных граничных мод (NEM), являющихся прямым аналогом оптических локализованных краевых мод в фотонных кристаллах [3]. Найдено дисперсионное уравнение NEM и получено его аналитическое решение для случая толстых слоев. Показано, что длина локализации нейтронов L оценивается как L ~(dbN)-1, где b длина рассеяния нейтронов, d период структуры, N плотность ядер в слое. Оценки времени локализации нейтронов показывают, что время ~103 sec (близкое ко времени жизни свободных нейтронов) для тепловых нейтронов требует использования слишком больших образцов ~ 102 cm. Для того же времени локализации нейтронов при их энергии ~ 10-4 eV толщины образцов оказываются вполне приемлимыми ~ 10-1 cm. Кратко обсуждены возможности наблюдеия NEM. Предлагается использовать NEM для ультра высокой монохроматизации тепловых нейтронов путем возбуждения NEM в совершенных кристаллах легких элементово [4]. Работа поддержана грантами РФФИ № 16-02-0295_a и 16-02-0679_a .

[1] Nesvizhevskii V.V., Voronin A.Yu. et al. // Nature Physics, 2010, v. 6, p.114.

[2] Belyakov V.A,.Kaputkina N.//Proceeding of XIV Interrnational workshop «Nanophysics and Nanonoelectronics» (N.Novgorod, 2010), V.2, p.327.

[3] Belyakov V.A, and S.V.Semenov // Zh.Eksp.Teor.Fiz., 2009, v.136, p.797 (English translation JETP) 109, 687 (2009).

[4] Belyakov V.A // American Conference on Neutron Scattering, 2016, Program, HP2.03, p.134.

ДИФРАКТОМЕТР ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ НА РЕАКТОРЕ ИБР-2

Бескровный А.И., Балагуров А.М., Журавлев В.В., Миронова Г.М., Неов Д., Шеверёв С.Г., Куликов С.А., Приходько В.И., Левчановский Ф.В., Богдзель А.А., Круглов В.В., Сиротин А.П., Чураков А.В., Кирилов А.С., Мурашкевич С.М., Петухова Т.Б., Литвиненко Е.И.
Объединённый институт ядерных исследований
e-mail: beskr@nf.jinr.ru

На ИБР-2 в г.Дубна на нейтронном пучке 6А создан специализированный дифрактометр в реальном времени–ДРВ, предназначенный для изучения переходных, необратимых процессов с характерными временами от долей секунды до десятков минут.

Основные направления исследований на RT-дифрактометре – изучение необратимых процессов в конденсированных средах in situ и в реальном времени: кинетика фазовых переходов, твердофазные химические реакции, плавление, солидификация, диффузия легких элементов в керамических средах, кристаллизация стекол, окисление металлов, гидратация-дегидратация полимеров и липидов и т.д.

Детекторная система на углах 0°–5°, 30°–90°,150°–170° и доступный интервал длин волн 0.5-20Å обеспечивают регистрацию дифракционных спектров в диапазоне 0.5–300Å.

Для исследований с монокристаллами и мультислойными структурами используются трёхосный гониометр и двухкоординатный ПЧД.

Дифрактометр оборудован печами на температуры 20–1150°C, рефрижератором на 8–350 К, герметичной камерой влажности от –30 до +100°C, камерой с электрическим током через образец до 10А.

Таким образом, создан дифрактометр ДРВ для реализации разнообразной программы исследований конденсированного состояния: Эксперименты в реальном времени. Исследование кристаллической и магнитной структур. Исследование фазовых переходов. Диффузное рассеяние в дефектных кристаллах. Изучение доменной структуры. Регистрация сверхструктурных рефлексов в модулированных структурах. Низкоразмерные и несоразмерные структуры.

Приём заявок на эксперимент http://flnp.jinr.ru/.

Работа поддержана грантами РНФ 14-12-00516 и РФФИ 14-02-00688.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНОГО ВОЛОКНА РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫМИ И ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Благов А.Е.[1,2], Кумсков А.С.[1,2], Григорьев Ю.В.[1,2], Лигачева Е.А.[3], Просеков П.А.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Таргонский А.В.[1,2], Фоломешкин М.С.[3]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ "Курчатовский Институт", Москва

[3] Московский авиационный институт (МАИ)

e-mail: folmaxim@gmail.com

Углеродное волокно (УВ) находит широкое применение в различных областях промышленности благодаря обширному комплексу полезных свойств, которые определяются в основном структурными особенностями УВ, что вызывает необходимость их изучения.

Целью работы являлось определение оптимальных методик исследования структуры УВ на основе сочетания рентгеновских методов и методов электронной микроскопии; определение основных параметров структуры УВ, таких как размеры кристаллитов (L_c, L_a) и межплоскостное расстояние в них (d_{002}); получение микрофотографий структуры УВ.

В качестве исследуемых образцов в работе использовались высокопрочные УВ из полиакрилонитрила.

Полученные рентгенодифракционные зависимости представлены на рис. 1 (SmartLab Rigaku 9кВт, MoKα). По отражениям 002 и 100 были определены структурные параметры УВ: d_{002} = 0,3476 нм; L_a = 15,837 нм; L_c = 4,09 нм.

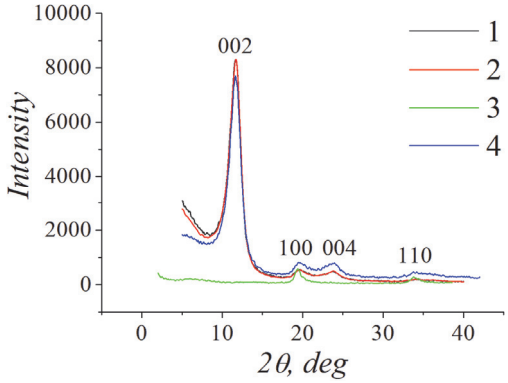


Рис.1. Кривые дифракционного отражения при различной ориентации образца. 1,2 — взаимно перпендикулярные направления в геометрии Брэгга;3,4 — взаимно перпендикулярные направления в геометрии Лауэ.

Для исследований структуры УВ в работе применялись методы просвечивающей (ПЭМ FEI Osiris) и растровой (РЭМ FEI Scios) электронной микроскопии. УВ имеют средний диаметр ~5 мкм и поры внутри объема, на микрофотографиях с высоким разрешением (ВРЭМ) получены изображения разориентированных графитовых плоскостей, которые образуют кристаллиты с преимущественной ориентацией вдоль оси волокна. Результаты исследований РЭМ, ВРЭМ дополняют рентгенодифракционные данные, при этом требуются дополнительные исследования, поскольку дифрактограммы характеризуют средние по объему значения параметров структуры, тогда как по полученным микрофотографиям можно оценить структуру УВ лишь на их поверхности.

В дальнейшем планируется развитие методик для изучения структуры УВ путем привлечения метода малоуглового рентгеновского рассеяния, текстурного анализа и электронной микроскопии, а также будет проведена оценка возможности применения данного подхода в исследованиях других видов УВ.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-29-14057 офи_м).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЕК ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССОВ В ЭЛЕКТРОДАХ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Бобриков И.А.[1], Иваньшина О.Ю.[1,2], Сумников С.В.[1], Самойлова Н.Ю.[1], Балагуров Д.А.[1], Балагуров А.М.[1]

[1] ОИЯИ

[2] НИИЯФ МГУ

e-mail: bobrikov@nf.jinr.ru, oyuivanshina@mail.ru

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) являются одними из наиболее используемых электрохимических источников тока. Улучшение эксплуатационных характеристик ЛИА требует понимания структурных процессов, происходящих в электродах аккумуляторов во время работы. Дифракция нейтронов позволяет эффективно изучать структуру и микроструктуру электродных материалов *in-situ* (в электрохимической ячейке, аккумуляторе и т.д.) и *operando* (в процессе заряда-разряда электродов): нейтроны обладают большой проникающей способностью, а также чувствительны к легким элементам и элементам с близкими атомными массами. Исследование коммерческих ЛИА представляет интерес, но не позволяет изучать работу новых электродных материалов. Кроме того, дифрактограммы коммерческих аккумуляторов содержат множество примесных рефлексов от вспомогательных элементов аккумулятора. Для проведения *in-situ* и *operando* нейтронного структурного анализа процессов в электродах ЛИА важной задачей является создание специальных электрохимических ячеек. С одной стороны, важна стабильность работы таких ячеек и получение воспроизводимых результатов. С другой стороны, часть ячейки, попадающая под пучок нейтронов, должна содержать большое количество электродного материала и минимальное количество компонентов, снижающих качество дифракционного спектра. Электрохимические ячейки, удовлетворяющие перечисленным требованиям, были разработаны в ЛНФ ОИЯИ и позволили исследовать структуру новых электродных материалов непосредственно во время их работы.

В докладе представлена информация о конструкции созданных в ЛНФ ОИЯИ ячеек, методика приготовления электродов для этих ячеек и примеры *operando* экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, (проект №14-12-00896).

НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР С ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПЛОСКОСТЬЮ ОБРАЗЦА ГРЭИНС НА РЕАКТОРЕ ИБР-2: ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Боднарчук В.И.[1], Авдеев М.В.[1], Петренко В.И.[1,2], Томчук А.В.[1,2], Гапон И.В.[1,2], Нагорный А.В.[1,2], Ульянов В.А.[3], Булавин Л.А.[2], Аксенов В.Л.[1,3]

[1] Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна МО, Россия
[2] Физический факультет, Киевский национальный Университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина
[3] Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина ЛО, Россия
e-mail: bodnarch@nf.jinr.ru

На реакторе ИБР-2 началась эксплуатация нового времяпролетного нейтронного рефлектометра с горизонтальной плоскостью образца (вертикальной плоскостью рассеяния) ГРЭИНС [1]. Реализованная геометрия рассеяния позволяет проводить комплексные исследования структуры наноразмерных объектов в конденсированном и жидком состояниях путем измерения зеркального коэффициента отражения и интенсивности диффузного рассеяния пучка тепловых нейтронов от поверхности, включая интерфейсы воздух/жидкость и твердое тело/жидкость, в широком интервале переданных импульсов. Данный метод позволяет восстанавливать плотность длины рассеяния изучаемого объекта в направлении перпендикулярном границе раздела сред от нескольких нанометров до нескольких сотен нанометров. Анализ незеркально рассеянных нейтронов позволяет определять латеральные особенности поверхностей и межслойных границ, вызванные процессами неоднородной адсорбции, межслойной диффузии, окисления и др. В докладе обобщен первый опыт эксплуатации рефлектометра ГРЭИНС, представлены его важнейшие характеристики и возможности для исследований широкого класса задач, связанных с различными интерфейсами.

[1] M.V. Avdeev, V.I. Bodnarchuk, et al. // Journal of Physics: Conference Series 251 (2010) 012060.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ НЕЙТРОННОГО ДИФРАКТОМЕТРА ДИСК НА РЕАКТОРЕ ИР-8

Борисова П.А., Глазков В.П.

НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: borisovapa@mail.ru

Суперпозиционный мультидетекторный нейтронный дифрактометр ДИСК [1], установленный на исследовательском реакторе ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт» модернизирован в 2008 г.

Детекторная система разработана специально для дифрактометра ДИСК и предназначена для регистрации рассеянных тепловых нейтронов в диапазоне длин волн 1-2,7 Å, и представляет собой 224 сцинтилляционных счетчика, сгруппированных в отдельные модули по 7 штук. Чувствительный объем каждого счетчика имеет площадь входного окна равную 5×50 мм^2 и образован из трех слоев сцинтилляционного экрана. Модули представляют собой замкнутое интеллектуальное устройство, которое обеспечивает управление режимом регистрации, питание фотоумножителей, сбор и накопление данных, и связь с управляющим компьютером.

Главной особенностью дифрактометра является высокая светосила, достигаемая с помощью суперпозиционного метода регистрации и эффективной защиты. Высокая светосила позволяет значительно расширить область использования ДИСКа, по сравнению со стандартными дифрактометрами: сверхмалые количества вещества (порядка 1 мм^3 в камерах высокого давления с сапфировыми наковальнями), высокие давления, слабо рассеивающие или сильно поглощающие вещества.

[1] Glazkov V.P., Naumov I.V., et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1988, V. 264, № 2, P.367–374.

ДИНАМИЧЕСКИЙ МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ МЕТАЛЛОВ С БЕСПОРЯДКОМ

Валеев В.Г.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: valeyevvg@gmail.com

Метод функционала плотности сводит многоэлектронную задачу со взаимодействием к задаче о движении системы невзаимодействующих частиц той же плотности в самосогласованном поле и может служить инструментом изучения возможного перехода металл-изолятор в двумерных слабо неупорядоченных системах [1].

В работе развита теория динамического функционала плотности (TD DFT) для системы взаимодействующих электронов с беспорядком. Она основана на теории поля Келдыша [2], позволяющей произвести усреднение по статическому беспорядку в непосредственно производящем функционале, обойдя процедуру усреднения существенно нелинейного уравнения Кона-Шэма с априори неизвестным потенциалом. Ее основной результат состоит в построении новой формулировки TD DFT: плотность электронов и ток в системе определяются неравновесной функцией распределения кон-шэмовских частиц. Обменно-корреляционный потенциал (V_{xc}) вводится как самосогласованное поле в уравнении для седлового многообразия функции Грина-Келдыша-Кона-Шэма. Это уравнение имеет вид квантового уравнения Узаделя, но является бесстолкновительным. Его анализ приводит к динамическому обобщению уравнения Шэма-Шлютера для V_{xc} и позволяет вычислить поправки к нему, соответствующие низкотемпературной диффузии электронов в неупорядоченном проводнике с кулоновским взаимодействием. Поправка к обменно-корреляционному ядру, рассчитанная в приближении линейного отклика, имеет верную асимптотику в пространстве ($\sim 1/q^2$) и описывает существенно неадиабатические процессы в системе; в двумерном случае она логарифмически расходится с температурой, т.е. $\sim \ln(T\tau_i)$, где τ_i – время упругих столкновений.

[1] Dobrosavljevic V. et al (eds.), Conductor Insulator Quantum Phase Transitions (Oxford University Press, 2012).

[2] Келдыш Л.В. // ЖЭТФ, 1964, том 47, с. 1515-1527; Kamenev A. and Andreev A., Phys. Rev., 1999, vol. B 60, p. 2218-2238.

ДИФРАКЦИОННОЕ КАРТОГРАФИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ И ИХ ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА

Велигжанин А.А.[1], Зубавичус Я.В.[1], Чернышов А.А.[1], Сундеев Р.В.[2], Шалимова А.В.[2]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина*
e-mail: veligzhanin_aa@nrcki.ru

В работе представлены результаты дифракционного исследования кристаллических образцов, подвергнутых пластической деформации в камере Бриджмена. В условиях подавления разрушения, материал с высокой склонностью к аморфизации претерпевает ряд структурных аморфно-кристаллических переходов, причем характер изменения структуры зависит от радиальной координаты на образце. Рентгеновская дифракция на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского источника синхротронного излучения позволяет получать дифракционные данные с субмиллиметровым пространственным разрешением, подходящим для исследования подобного типа образов.

Для исследования структурных процессов деформации, важно характеризовать изменения, происходящие в ближайшем локальном окружении атомов, на расстояниях в несколько межатомных расстояний, например, в полосах сдвига, по которым происходит релаксация. Для этого, без потери пространственного разрешения, использован формализм функций парных корреляций, описывающий распределение парных расстояний в образце на основе дифракционного эксперимента.

Представлена автоматическая процедура обработки данных эксперимента, определяющая степень кристалличности образца, текстуру в кристаллической фазе, а также функцию парных корреляций из дифракционных данных с минимальным участием оператора, что позволяет обрабатывать и визуализировать большой объем экспериментальных данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 16-02-00144_а и 15-02-02621_а). Велигжанин А.А. благодарит Совет по грантам при президенте Российской Федерации за предоставление стипендии в 2016 году.

Российской Федерации за предоставление стипендии в 2016 году.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ АГЛОМЕРАТЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ (структурный класс $P2_12_12_1$, Z=4(1))

Геворгян А.А., Малеев А.В., Игонин В.А., Потехин К.А.
Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых
e-mail: armkir777@gmail.com

В работе [1] авторы отмечали, что асимметрические изохиральные молекулы в молекулярных кристаллах могут объединяться в молекулярные цепи P_c2_1,Z=2(1) и молекулярные слои P_l2_1,Z=2(1). Там же приведено последовательное описание наиболее типичных вариантов строения молекулярных кристаллов. Мы рассматриваем геометрические и энергетические характеристики возможных молекулярных цепей и слоев в кристаллических структурах, реализованных в структурном классе $P2_12_12_1$, Z=4(1).

Для описания геометрического строения указанных цепей предлагается использовать следующие характеристики: T – период трансляции вдоль цепи, $d(2_1)$ – расстояние между геометрическими центрами ближайших молекул, связанных винтовой осью, $\Delta=T-d(2_1)$, $T/d(2_1)$ – разность и отношение этих двух расстояний, d^* – расстояние от геометрического центра молекулы в цепи до винтовой оси 2_1. Энергии межмолекулярного взаимодействия пар молекул, связанных трансляцией вдоль цепи, и пар молекул, связанных винтовой осью, координаты которых рассчитаны методом атом-атомных потенциалов, обозначены соответственно $E(T)$ и $E(2_1)$, соответственно.

Цель работы: используя указанные геометрические и энергетические характеристики, разработать алгоритм выявления и описания молекулярных цепей указанного типа. Для апробации алгоритма рассмотрен ряд кристаллических структур замещенных N,N-диметил-1-фенилэтиламинов и замещенных 1,3-дигидроизобензофуранов. В докладе приводятся примеры разных механизмов агломерации, которые условно можно отнести к двум структурным подклассам структурного класса $P2_12_12_1$, Z=4(1), соответствующих схемам агломерации:

1–$P_{c(X)}2_1$,Z=2(1)↑↑$P_{l(XY)}2_1$,Z=2(1)↑↓$P2_12_12_1$,Z=4(1) и

1–$P_{c(X)}$,Z=2(1)↑↓$P2_12_12_1$,Z=4(1).

[1] Зоркий П.М., Зоркая О.Н. // Журнал структурной химии, 1998, том 39, №1, с 126 –153.

СТАНЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ И МИКРОТОМОГРАФИИ КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Гогин А.А., Сенин Р.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: Gogin_AA@nrcki.ru

Описаны параметры станции и приведены примеры исследований. Станция [1] позволяет проводить томографические исследования внутренней структуры объектов разной природы размером от 1 до 50 мм с характерным размером неоднородности от 2 до 1000 мкм. Для реконструкции внутренней структуры образцов используется ПО, разработанное в ИК РАН. Для анализа неоднородностей различного масштаба имеется возможность быстрой перестройки по энергии и замены детектирующего устройства. Благодаря вариативности параметров съемки список исследуемых образцов разнообразен - биологические образцы, объекты культурного наследия, минералогические образцы, а также многослойные неорганические структуры.

Также рассмотрены перспективы развития станции и возможные пути усовершенствования методик съемки.

[1] Сенин Р.А., Хлебников А.С., Вязовецкова А.Е., Блинов И.А., Голубицкий А.О., Казаков И.В., Воробьев А.А., Бузмаков А.В., Асадчиков В.Е., Шишков В.А., Мухамеджанов Э.Х., Ковальчук М.В. МОДЕРНИЗИРОВАННАЯ СТАНЦИЯ “РЕНТГЕНОВСКАЯ ТОПОГРАФИЯ И МИКРОТОМОГРАФИЯ” НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ //Кристаллография. 2013. Т. 58. № 3. С. 510.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛНОРАЗМЕРНОГО БЕЛКА ЯДЕРНОГО ЭКСПОРТА (NEP) ВИРУСА ГРИППА А В РАСТВОРЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Головко А.О.[1], Богачева Е.Н.[1], Федорова Н.Ф.[1], Друца В.Л.[1], Баратова Л.А.[1], Джеффрис С.М.[2], Штыкова Э.В.[1]

[1] НИИ физико-химической биологии им. А.Н.Белозерского

[2] European Molecular Biology Laboratory

e-mail: viwopisx@yahoo.co.uk

Белок NEP вируса гриппа один из компонентов в составе супрамолекулярного комплекса, образующегося в процессе экспорта вирусных РНП через мембрану ядра инфицированной клетки. Только С-концевой домен (аминокислоты 64-121) был доступен для рентгеновского анализа, структурные исследования затруднены нерастворимостью белка. Мы анализировали структуру NEP совокупностью методов SAXS и online вытеснительной хроматографии (SEC-SAXS). Обнаружено присутствие двух фракций белка в растворе. Первая состояла из больших агрегатов, во второй обнаруживалось кластеры NEP, их характеристики были определены методом ab initio восстановления формы. Подобные кластеры представляют собой организованные спиралеобразные частицы, длиной ~ 20 нм и диаметром спирали ~ 5 нм, состоящие из схожих частиц (рассматриваемые как индивидуальные макромолекулы NEP) размером около 2 нм. Подобные кластеры, типичные для большинства вирусных белков, особенно для белков, взаимодействующих с мембраной. Для дополнительного изучения образования ассоциатов NEP, проведен поиск α-спиралей в структуре NEP, использована концепция неупорядоченных/неструктурированных белков, выполнена SSE с помощью программного обеспечения Psipred. Предсказание 3D структуры N-домена NEP с применением программы Scratch Protein Predict (SPP) и программного обеспечения Modeller 9.8 привело к противоречивым результатам. Предсказание структурированных (спираль) и неструктурированных фрагментов полипептидной цепи с помощью сервера RaptorX привело к почти сходимости результатов программы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 16-04-00563.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ НА 2D-3D ИНТЕРФЕЙСАХ НИТРИДНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОНОВ

Гричук Е.С., Валеев В.Г.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: evgeny.sg@gmail.com

Уникальные физические свойства нитридных гетероструктур и связанные с этим перспективы разработки широкого класса высокопроизводительных микро- и наноэлектронных устройств сделали их одним из наиболее важных объектов прикладных исследований. Одна из существенных проблем в этой области состоит в создании низкоомных омических контактов к двумерному электронному газу (2DEG).

Текущие исследования в этой области, как правило, основаны, на анализе относительно простых физических моделей, не учитывающих геометрических особенностей области контакта и дискретности электронного спектра 2DEG. Подобные модели (например, модель диффузии-дрейфа) широко используются, хотя и содержат большое число свободных параметров, что позволяет потребителю успешно аппроксимировать экспериментальные кривые, де факто в ущерб адекватности подобного подхода. Однако априори ясно, что используемые в этих моделях физические приближения не позволяют последовательно исследовать ряд важных вопросов, в частности, роль кинетических явлений на 2D-3D интерфейсах между 2DEG и невплавными омическими контактами (n^+GaN) в нитридных гетероструктурах.

Описание кинетических явлений в контактах без учета эффектов размерного квантования давно известно [1], однако его обобщения на случай размерно-квантованных систем в настоящее время не существует. Наша работа восполняет этот пробел. В работе построена модель, описывающая физические свойства контактов n^+GaN–2DEG. С помощью стандартных численных схем самосогласованного решения уравнений Больцмана, Пуассона и Шредингера рассмотрены линейные и нелинейные явления, возникающие в системе во внешнем поле и обусловленные особенностями ее геометрического строения и размерным квантованием электронного спектра 2DEG.

[1] Янсон И.К., Шкляревский О.И. // ФНТ, 1986, том 12, № 9, с. 899.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК ВОЛЬФРАМА МЕТОДОМ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Гурьева П.В.[1, 2], Князев Г.А.[1], Новоселова Е.Г.[2], Смирнов И.С.[2], Шупегин М.Л.[3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

[3] ФГБНУ «НИИ перспектиных материалов и технологий»

e-mail: poli.b3@gmail.com

В настоящее время тонкие пленки вольфрама, формируемые различными методами, находят широкое применение для многих технических приложений: диффузионные барьеры в полупроводниковых технологиях, защитные маски в рентгеновской литографии, рабочие слои в многослойных интерференционных структурах для управления потоками рентгеновского излучения, защитные покрытия внутренних поверхностей токомаков. При этом во всех случаях важной является информация о структуре, пористости и морфологии пленок, которые определяют их функциональные свойства.

В работе исследованы пленки W, полученные методом магнетронного распыления вольфрамовой мишени. Пленки вольфрама толщиной 100-200 нм наносились на плоские стеклянные подложки и стеклянные капилляры диаметром 0.5 мм. Измерения проводилась на канале 6.2 Курчатовского источника синхротронного излучения. Станция EXAFS-D оснащена позиционно-чувствительным детектором Inel CPS180, имеющим радиус изгиба 180 мм и позволяющим проводить регистрацию рассеянного излучения одновременно в угловом интервале 120^0 в области малых или больших углов дифракции. Использование данного детектора позволило реализовать классическую схему Дебая-Шеррера.

В результате проведенных исследований показано, что в зависимости от условий осаждения на капилляр могут формироваться как пленки вольфрама с обычной оцк структурой, характерной для объемного материала, так и пленки со структурой β-W (A15), которая для объемного материала является метастабильной. В докладе приводятся также результаты предварительных исследований структуры нанокомпозитных пленок на основе полифенилметилсилоксана, содержащих вольфрам.

СТАНЦИЯ РЕФРА

Демкив А.А.

НИЦ Курчатовский институт”

e-mail: andrey.demkiv@gmail.com

Станция РЕФРА получила своё название по первой тематике работы – рефракционные рентгеновские линзы [1]. На станции проводилось изготовление рентгеновских преломляющих линз, исследование их характеристик, а также работа с мультикапиллярной и пузырьковой линзами. Работа с фокусирующими элементами служит основой для методов с высокой пространственной разрешающей способностью.

В настоящее время на станции проводятся исследования археологических образцов [2] методом рентгенофлуоресцентного анализа, который основан на возбуждении флуоресценции образца рентгеновским излучением и последующем анализе спектра флуоресценции. Метод позволяет определить элементный состав образца. Оборудование станции позволяет регистрировать характеристические линии элементов от кальция и тяжелее. Снятие спектра флуоресценции в различных точках протяжённого образца позволяет составить карту распределения элементов. На станции построен спектрометр с возможностью сканирования плоского образца, область сканирования (50*90)мм. Минимальный шаг узла сканирования составляет 0.05мкм по горизонтали и от 6 до 14 мкм по вертикали. Разработанное программное обеспечение позволяет проводить сканирование в автоматическом режиме и визуализацию карты распределения элементов и применяется для прочтения стёртых и угасших надписей на древних артефактах, уточнения рецептур древних чернил, красок и покрытий, для датировки артефактов.

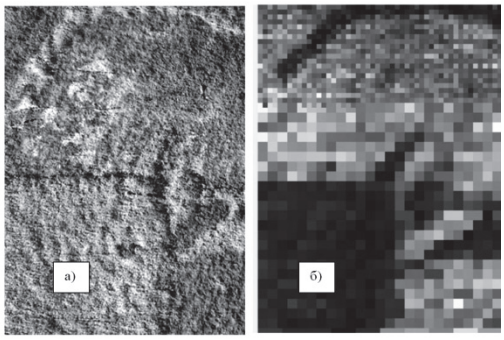


Рис 1. а) фото исследованного участка петроглифа. б) карта распределения элемента марганца в той же области петроглифа

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

[2] Дэвлет Е.Г. (2014а) К вопросу о технико-технологических особенностях петроглифов Пегтымеля // Российская археология № 3, С. 66-78.

СИНХРОТРОННАЯ СТАНЦИЯ БЕЛОК-2: УСТРОЙСТВО И ВОЗМОЖНОСТИ

Дороватовский П.В.[1], Поляков К.М.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН
e-mail: paulgemini@mail.ru

Станция предназначена для проведения высокоскоростной и высокоточной рентгеновской дифрактометрии макромолекулярных монокристаллов в широком диапазоне энергий излучения. Станция позволяет осуществлять рентгеноструктурный эксперимент на монокристаллах белков за считанные минуты. Она обеспечивает надежное и точное измерение слабых аномальных сигналов для решения фазовой проблемы и идентификации сорта атомов в структуре, получение дифракционных данных от кристаллов с очень большими периодами решетки, съемку с атомным разрешением. Белок-2 аналогична и даже превосходит по параметрам рентгеноструктурные станции, построенные на излучении от поворотных магнитов источников СИ третьего поколения. Станция установлена на пучке из сверхпроводящего вигглера с полем 3Т. В состав фокусирующего канала входят: предварительное коллимирующее зеркало, комбинированный 2х кристальный (Si(111))/ 2х зеркальный (Pd/B4C) монохроматор, тороидальное фокусирующее зеркало. Используемый диапазон длин волн 5кэВ - 20кэВ. Размеры пучка (ПШПВ при 13 кэВ, гор. х верт.) 348 мкм х 305 мкм. Поток фотонов на образце через апертуру размером 50мкм х 50мкм составит 2.62E+011 фот/с. Станция оснащена температурной приставкой (80-500К) и энергодисперсионным детектром.

РЕНТГЕНОИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЕЙ ДЕФОРМАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Si

Дрмеян Г.Р.
Гюмрийский государственный педагогический институт, Гюмри, Армения
e-mail: drm-henrik@mail.ru

Известно [1,2], что, если в одном из блоков интерферометра внести дефект определенного типа (например, дислокацию), тогда поле механических напряжений, возникающее вокруг данного дефекта, приведет к изменению муаровой картины. Изменение муаровой картины будет заключать в себе информацию о механических напряжениях. Такое имеет место и тогда, когда в кристалле имеются дефекты, или дислокации, зарожденных под воздействием механических повреждений, например, царапина, нанесенная на поверхность кристаллической пластинки.

Исследования влияния механических напряжений на рентгеноинтерференционную картину были проведены во многих работах, например, в [3,4] с помощью муаровых картин исследованы поля напряжений в монокристаллах, содержащих дислокации, рассчитана модуль упругости кремния. Однако, в этих работах применяются традиционные методы определения упругих постоянных кристаллов, недостатком которых является то, что этими методами вычисляется эффективный динамический модуль упругости (усредненный модуль по всему кристаллу). Поэтому дальнейшее более детальное рентгено-интерферометрическое исследование структурных несовершенств кристаллов, вызванных различными внешними воздействиями, вообще, и изучение поперечных деформаций, вызываемых механическими напряжениями, в частности, являются актуальной задачей физики твердого тела, чему и посвящена настоящая работа. Практическая значимость таких исследований также очень важна, ибо изучение и контроль дефектных структур важно для производства материалов электроники и полупроводниковых приборов.

Нами предложен новый рентгено-интерферометрический метод, который позволяет не только точно определить модуль упругости, но и ее компоненты для дефформированных областей кристалла (блок интерферометра), вызванных дислокацией, зарожденных под воздействием внешней силы, т.е. ее локальные значения для тех областей кристалла, от которых образуются муаровые полосы. Показано, что для кристалла, содержащего дислокации, значение модуля упругости уменьшается. При этом чем больше плотность дислокации, тем больше уменьшается модуль упругости.

Результаты наших исследований положили основу для решения обратной задачи, а именно, восстановление полей механических напряжений в кристаллических блоках интерферометра с помощью расшифровки муаровых картин.

Цель достигается с помощью внесеные дислокаций в блоке интерферометра.

[1] Christiansen G., Gerward L. and Lindegaard Andersen A. A Studi of the Strain Field of Grown-in Dislocations in a Silicon X- Ray Interferometer.// J. Appl. Cryst.- 1971.- 4.- P. 370.

[2] Эйрамджян Т.О., Алумян К.В., Белубекян Э. В. Применение рентгено-интерферометрических методов для исследования полей напряжений в монокристаллах, содержающих дислокаццции // Известия ЕГУАС.- 2007.- №1.- С. 65-66.

[3] Drmeyan H.R. Study of Deformation Fields as a Function of the Temperature Gradient in the Mirror Block of an Interferometer // Crystallography Reports.- 2005.-V.- 50.- № 3.- pp. 363-366.

[4] Дрмеян Г.Р., Абоян А.О., Эйрамджян Ф.О. Рентгено-интерферометрические исследования полей деформаций в ионноимплантированных кристаллах кремния // Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и Нейтронные исследования.-2011.- № 2.- С. 47-48.

ПОЗИТРОННАЯ ДИАГНОСТИКА РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ, ОБЛУЧЕННОГО ПРОТОНАМИ

Дубов Л.Ю.[1,2], Штоцкий Ю.В.[1,2], Степанов С.В.[2], Акмалова Ю.А.[1]

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

[2] *НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ»*

e-mail: lydubov@mephi.ru

Работа электронного оборудования в радиационных полях ядерных реакторов, в научных ускорителях и ядерно-медицинских установках предъявляют серьезные требования к радиационной стойкости полупроводниковых приборов. Для разработки приборов с нужными характеристиками необходимо детальное понимание процессов, возникающих при радиационном облучении.

При воздействии высокоэнергетического излучения в полупроводниках образуются первичные радиационные дефекты – пары Френкеля. Первичные вакансии и междоузлия могут формировать более крупные дефекты. При нейтронном и ионном облучении образуются значительные концентрации дивакансий, а также наноразмерные области разупорядочивания кристаллической структуры.

Целью настоящего исследования являлось определение методом спектроскопии времени жизни позитронов структуры радиационных дефектов в кремнии при высокодозном протонном облучении, а также изучение поведения дефектов при последующем отжиге облучённых образцов [1].

В результате исследования радиационных дефектов, возникающих в кремнии марки КЭФ-4,5 после протонного облучения (E_p = 21 МэВ) с флюенсом 1.2×10^{16} p+/см^2 обнаружен эффект «временного насыщения» концентрации вторичных дефектов с резким скачком при дозах ~10^{19} пар Френкеля на см^3. При этом время жизни позитронов в дефектах аномально низкое - около 290 пс. Наблюдаемые эффекты могут быть связаны с тем, что при больших флюенсах протонов и T≈300 K многовакансионные кластеры за счет анизотропии кристалла Si образуются в виде цепочек вакансий вдоль кристаллографического направления 121.

[1] Funtikov Yu.V., Dubov L.Yu., Shtotsky Yu.V., Stepanov S.V. // Proceedings of «ICPA-17 IC Positron Annihilation 2015», in print.

АТОМНАЯ СТРУКТУРА ПЬЕЗОЭЛЕКТРИКОВ $La_3Ga_5SiO_{14}$ И $La_3Ga_5GeO_{14}$: ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЯЧЕЙКИ РАЗНОГО СОСТАВА В ОДНОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ

Дудка А.П.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

dudka@ns.crys.ras.ru

Лангасит $La_3Ga_5SiO_{14}$ (**LGS**) дал имя обширному классу пьезоэлектрических и оптических материалов. Железосодержащие соединения являются мультиферроиками. В структуре кристаллов имеется четыре вида полиэдров (**2*d*, 3*f*, 1*a*, 3*e***). В **LGS позиция 2*d*** имеет **смешанную заселенность** *q*(Ga):*q*(Si)≈1:1. Изоморфное замещение Si → Ge дает кристалл $La_3Ga_5GeO_{14}$ (**LGG**).

Логично предположить, что каждому катиону соответствует свое кислородное окружение и параметры далеких атомов. **Сравнительное исследование** кристаллов с изоморфным замещением атомов и при разных температурах позволило выявить разупорядочение атомов на новом уровне - «разделить» ячейки с разным атомным составом. Чтобы «разделение» ячеек стало возможным, недостаточно высокой точности каждого исследования: например, для **LGS** при 293 K: пр.гр. *P*321, Z=1; <*a*>=8.1654(3), <*c*>=5.0960(2) Å, R/R_w=0.62/0.59%, $\Delta\rho_{min}/\Delta\rho_{max}$=–0.42/+0.27 э/Å^3 для 3979 независимых рефлексов. Выводы основаны на обработке **8 наборов данных**, измеренных до **$\sin\theta/\lambda|_{max}$~1.35 Å^{-1}**, а повторные съемки привели к **воспроизводимым результатам**, необходимым для сравнения структур.

Найдено, что кристаллы состоят из ячеек двух типов: в половине из них в позиции 2*d* находится Ga, в другой половине – Si (для **LGS**). Разными являются не только расстояния катион-кислород в этих 2*d*-тетраэдрах, но **каждый тип 2*d*-тетраэдров сочленен со «своими» 3*f*-, 1*a*- и 3*e*-полиэдрами**, хотя в них катионная позиция заселена атомами одного сорта. Для Ga-решетки 2*d*-тетраэдр увеличивается, 3*f*-тетраэдры – сминаются, а 1*a*-октаэдр и 3*e*-полиэдр уменьшаются по высоте.

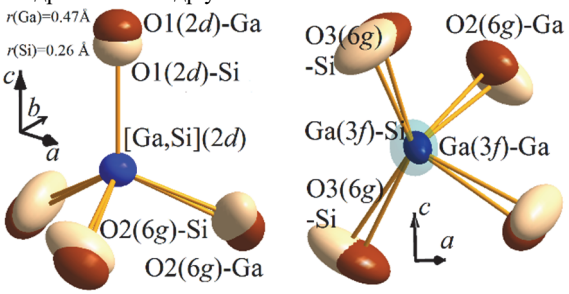


Рис. Кристаллы $La_3Ga_5SiO_{14}$ и $La_3Ga_5GeO_{14}$ состоят из элементарных ячеек двух видов, соответствующих двум типам 2d-тетраэдров.

Автор благодарит Милля Б.В. Работа выполнена на оборудовании ЦКП ИК РАН, RFMEFI62114X0005 при частичной поддержке РФФИ, 14-02-00531.

УТОЧНЕНИЕ АТОМНОГО СТРОЕНИЯ $Ba_3TaGa_3Si_2O_{14}$ И СТРУКТУРНАЯ ОСНОВА МУЛЬТИФЕРРОИЗМА В КРИСТАЛЛАХ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ЛАНГАСИТОВ

Дудка А.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Кристаллы семейства лангасита обладают пьезоэлектрическими, оптическими свойствами, а соединения с магнитными ионами в позиции 3*f* проявляют мультиферроизм.

Проведено **сравнительное исследование** кристаллов для определения влияния ионов железа на структуру. Основа - эксперименты разрешения $\mathbf{\sin\theta/\lambda|_{max}\sim 1.35\ Å^{-1}}$ с кристаллами без железа - $\mathbf{Ba_3TaGa_3Si_2O_{14}}$,$Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$,$Sr_3TaGa_3Si_2O_{14}$, и железосодержащими - $Ba_3TaFe_3Si_2O_{14}$,$Ba_3NbFe_3Si_2O_{14}$,$Sr_3NbFe_3Si_2O_{14}$. Результаты уточнения $\mathbf{Ba_3TaGa_3Si_2O_{14}}$: пр.гр. *P*321, Z=1; **293 K:** <*a*>=8.5158(11),<*c*>=5.1910(6)Å, R/R_w=0.66/0.67%, 4414 рефлексов; **101 K:** <*a*>=8.5109(9),<*c*>=5.1861(9)Å, R/R_w=0.76/0.93%, 4365 рефлексов.

Основание гипотезы – обнаруженная **аномалия в тепловом расширении железосодержащих лангаситов:** с понижением температуры коэффициент сжатия по оси *c* в 1.5-3 раза больше, чем по оси *a*, а в кристаллах без железа, наоборот, коэффициент сжатия по оси *a* в 1.5-3 раза превосходит его значение по оси *c*.

Структурным элементом, определяющим хиральность, оптическую активность (и мультиферроизм для железосодержащих) лангаситов являются **спирали электронной плотности**, формируемые катионами в позиции 3*f* и O3(6*g*). Если в позиции 3*f* находятся Fe^{3+}, добавляется магнитное взаимодействие Fe-O-O-Fe. При охлаждении структурные спирали из атомов железа и кислорода сжимаются как пружины по оси *c*, при T_N формируется магнитная спираль. Взаимное смещение атомов вызывает электрическую поляризацию, вектор которой параллелен оси магнитной спирали. Кристалл приобретает и магнитную, и электрическую поляризацию (**мультиферроизм**).

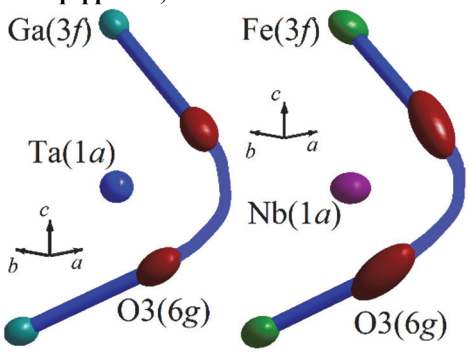


Рис. Разупорядочение вдоль линии спирали в железосодержащем $Sr_3NbFe_3Si_2O_{14}$ (справа) больше, чем в $Ba_3TaGa_3Si_2O_{14}$ (слева).

Автор благодарит Милля Б.В., Балбашова А.М., Любутина И.С. Работа выполнена в ЦКП ИК РАН,RFMEFI62114X0005 при частичной поддержке РФФИ,14-02-00531.

НОВАЯ АППАРАТНАЯ И ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА НА РЕНТГЕНОВСКОМ ДИФРАКТОМЕТРЕ HUBER-5042 С ГЕЛИЕВЫМ КРИОСТАТОМ DISPLEX DE-202 В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 20-350 K

Дудка А.П., Антипин А.М., Верин И.А.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Дифрактометр Huber-5042 с гелиевым криостатом Displex DE-202 является уникальным научным прибором. Большие расстояния в гониометре (525 мм) и точность установки углов (0.001°) дают высокое угловое разрешение. Гелиевый криостат имеет стабильность ±0.05 K в области 20–350 K. Только для таких криостатов штатные показания температуры соответствуют температуре образца.

Управление дифрактометром переведено на новую платформу: компьютер, блок считывания детектора, интерфейсы управления моторами, температурным контроллером и системой вакуумирования криостата. Новые программные средства включают ОС Ubuntu, программный конструктор Spec, набор драйверов для управления исполнительными устройствами. Разработаны новые методики: для быстрого поиска отражений; для прецизионного уточнения параметров ячейки с коррекцией систематических ошибок; для сбора данных с уникальным для эйлеровых гониометров измерением рефлексов в диапазоне 2θ 0°–152°.

Высокое качество получаемых экспериментальных данных было подтверждено в эксперименте с мультиферроиком GdFe3(BO3)4 при 30K: 2115 независимых рефлексов, R/wR=0.61/0.70% и Δρmin/Δρmax=–0.45/+0.38 э/Å3 в мультипольной модели валентной электронной плотности. Сочетание уникальных технических характеристик и инновационного программного обеспечения делают дифрактометр Huber самым точным прибором, а в области структурного анализа кристаллов при гелиевых температурах это преимущество еще значительнее.

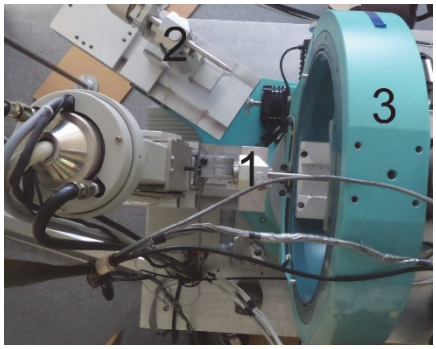


Рис. Измерение рефлексов в угловом диапазоне 2θ 0°–152° (трубка-1 и детектор-2 расположены по одну сторону от χ-кольца-3)

Авторы благодарят А.Ю. Серегина, А.Г. Куликова, Е.С. Смирнову, О.Н. Хрыкину за помощь в работе. Работа частично выполнена при поддержке РФФИ (14-02-00531, 16-02-00171).

СРАВНЕНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ $Sr_3NbGa_3Si_2O_{14}$ И $Sr_3NbFe_3Si_2O_{14}$: ДЕФОРМАЦИИ АТОМНЫХ ПОЛИЭДРОВ В ЛАНГАСИТАХ ПРИ ИЗОМОРФНОМ ЗАМЕЩЕНИИ КАТИОНОВ

Дудка А.П., Балбашов А.М.*
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
**Национальный исследовательский университет "МЭИ"*
dudka@ns.crys.ras.ru

Кристаллы $Sr_3NbGa_3Si_2O_{14}$ **(SNGS)** и $Sr_3NbFe_3Si_2O_{14}$ **(SNFS)** принадлежат к пьезоэлектрическому семейству лангасита. **SNFS,** отличается от **SNGS** изоморфным замещением Ga на Fe в 3*f*-тетраэдре. Наличие магнитных ионов делает **SNFS** перспективным мультиферроиком с T_N = 26 K. Согласно нашей гипотезе, структурная основа мультиферроизма – **спирали электронной плотности**, формируемые катионами в позиции 3*f* и атомами O3(6*g*). Следовательно, нужно оценить влияние Fe(3*f*) на свойства структурной спирали. Было проведено **сравнительное исследование** кристаллов **SNGS** и **SNFS** при разных температурах с использованием **повторных наборов данных ($\sin\theta/\lambda_{max}$~1.35 Å^{-1})**. Пример для **SNGS** при 293 K: пр. гр. *P*321, Z = 1; <*a*> = 8.2797(3), <*c*> = 5.0774(5) Å, R/R_w = 0.76/0.64%, $\Delta\rho_{min}$ / $\Delta\rho_{max}$ = –0.21 / +0.17 э/Å^3 для 3820 независимых рефлексов.

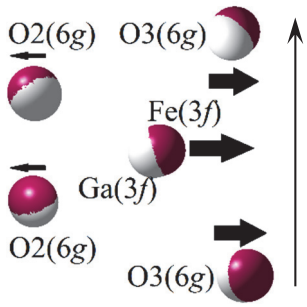


Рис.1. В SNFS атомы Fe(3f) и O3(6g) ближе к оси c ячейки (к оси спирали, справа), чем в SNGS.

Эффект от замены Ga на Fe в 3*f*-тетраэдре оказался весьма существенным [*r*(Ga/Fe)=0.47/0.49 Å]. Жесткие кремниевые 2*d*-тетраэдры увеличиваются в объеме и сдвигаются вверх по оси *c*. Полиэдр Sr(3*e*) увеличивается в высоту. **Атомы Fe(3*f*) и O3(6g) в SNFS ближе к оси *c* ячейки (к оси спирали), чем в SNGS**. Схожий эффект и при охлаждении **SNFS**: атомы Fe(3*f*) и O3(6*g*) еще больше приближаются к оси *c* ячейки. Объем ниобиевого 1*a*-октаэдра уменьшается, а закрутка O3(6*g*), расположенных на линии спирали, возрастает. Все это уменьшает диаметр спирали, сближает ионы железа, и должно вызывать **усиление магнитного взаимодействия**.

Авторы благодарят Милля Б.В. за кристаллы SNGS. Работа выполнена на оборудовании ЦКП ИК РАН (RFMEFI62114X0005) при частичной поддержке РФФИ (№ 14-02-90467, 14-02-00531) и Гос. Задания № 872.

КАКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ СЛЕДУЕТ УКАЗЫВАТЬ В ПУБЛИКАЦИЯХ ПО НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫМ СТРУКТУРНЫМ ИССЛЕДОВАНИЯМ?

Дудка А.П., Смирнова Е.С., Верин И.А.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
dudka@ns.crys.ras.ru

Низкотемпературные методы широко распространены в структурном анализе органических и белковых кристаллов (меньше радиационное повреждение); при изучении зарядовой плотности (меньше «тепловое размазывание», ТДР и ангармонизм); при поиске структурных фазовых переходов. В публикациях часто указывают температуру, равную порогу спецификации криоустройства (90 K). При использовании открытого потока газа (He_2, N_2), направленного на образец, температура считывается с датчика, размещенного у сопла, подводимого к образцу, но не на самом образце. Поэтому **существует градиент температуры датчик - образец**.

Проведена калибровка устройств CryoJetHT и Cobra Plus. Показано, что **реальная температура образца отличается от температуры**, регистрируемой датчиками. При максимально возможном охлаждении на образце устанавливается **101.5 вместо 90 K** для CryoJetHT и **90.4 вместо 82 K** для Cobra Plus. Результаты подтверждены измерениями параметров ячейки кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$ в области температурного фазового перехода с привлечением третьей "эталонной" системы охлаждения закрытого типа, для которой нет градиента температуры.

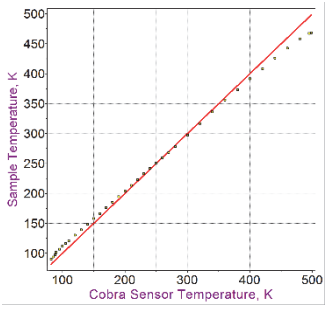


Рис.1. Зависимость реальной температуры образца от номинальной температуры датчика Cobra Plus

Ответ на вопрос заголовка: для охладителя закрытого типа нужно публиковать температуру по штатному датчику; для охладителя открытого типа нужно публиковать температуру по предварительной калибровочной кривой; если калибровка недоступна, можно указать температуру, основываясь на литературных данных. **Для интервала 80-100 K указываемая температура должна быть увеличена на 10-6K, до 90-106K.**

Авторы благодарят Шишкова В.А., Случанко Н.Е., Антипина А.М., Хрыкину О.Н. за помощь. Работа выполнена на оборудовании ЦКП ИК РАН (RFMEFI62114X0005) при частичной поддержке РФФИ (№ 14-02-00531, 16-02-00171).

АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ПЕРЕХОДНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ОСНОВАНИИ ПРИНЦИПА ИНВАРИАНТНОСТИ В.А. АМБАРЦУМЯНА

Егиазарян А.М.
Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения
e-mail: malpic@sci.am

Теория переходного излучения заряженной частицы в рентгеновском диапазоне было развита в работе [1] на основе решений уравнений Максвелла.

В настоящей работе предложен принцип инвариантности, развитый В.А. Амбарцумяном [2].

Согласно развитой теории, когда заряженная частица равномерно прямолинейно движется в безграничной среде, количество энергии, излучаемой в единицу времени единицей объема в направлении (θ, φ) определяется

$$B(\tau) = Ce^{-k\tau}, \quad (1)$$

где τ оптическая глубина частицы, а k определяется из следующего соотношения

$$\lambda = \frac{\sigma}{\alpha} = \frac{2k}{\ln\frac{1+k}{1-k}}$$

где σ - коэффициент рассеяния, α коэффициент ослабления при сферически симметричной индикатрисе излучения. Это решение справедливо в случае двухсторонней бесконечности. Решение реальной задачи, когда заряженная частица пересекает границу двух сред, при “вытянутей” индикатрисе излучения (излучение частицы происходит близко к направлению падения частицы), будет

$$B(\theta, \varphi) = (b_0 + b_1 \cos\theta)e^{-k\tau} \quad (2)$$

где b_0 и b_1 постоянные. Следовательно, интенсивность $I(\theta, \varphi)$ переходного излучения в оптической глубине τ, в направлении θ определим вычитанием выражения (1) от выражения (2), для интенсивности переходного излучения получается

$$I(\theta, \varphi) = (b_0 + b_1 \cos\theta - C)e^{-k\tau} \quad (3)$$

[1] Гарибян Г.М., К теории переходного излучения и ионизационных потерь энергии частицы, ЖЭТФ, т.37, вып.2 с. 527, 1959.

[2] Амбарцумян В.А., Изв. АН СССР, сер. геогр. и геофиз. № 3, 97, (1942).

СТРУКТУРНАЯ И ЭЛЕМЕНТНАЯ ДИАГНОСТИКА МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ ИОННО-ПУЧКОВЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Егоров В.К.[1], Егоров Е.В.[1], Афанасьев М.С.[2]
[1]ИПТМ РАН, Черноголовка +7(985) 114-27-24
[2]ИРЭ РАН, Фрязино, Россия
egorov@iptm.ru

В работе сделан детальный обзор возможностей структурной и элементной диагностики материалов комплексом ионно-пучковых методов, включающих в себя резерфордовское обратное рассеяние (РОР), рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) при ионном возбуждении, резонансные и пороговые ядерные реакции, спектрометрию ядер отдачи, оптическую ионолюминесценцию при ионном возбуждении и каналирование ионов в монокристаллических и эпитаксиальных структурах. Ионно-пучковый методический комплекс является недеструктивным и в мире признан одним из базовых аналитических подходов для диагностики материалов [1], но почти не развит в России. Метод РОР является единственным абсолютным инструментом для количественного элементного анализа материальных структур. Он многоэлементен и позволяет диагностировать весь комплекс элементов от Li до U с разрешением по глубине до 2 нанометров. РФА при ионном возбуждении (PIXE) представляется наиболее эффективным методом для определения легких элементов в веществе [2]. Спектрометрия ядер отдачи является уникальным методом для диагностики водорода в структурах [3]. Каналирование ионов позволяет однозначно констатировать наличие эпитаксии в гетероструктурах [4].

Обзор особенностей ионно-пучковой диагностики материалов обсуждается на базе экспериментальных результатов, полученных в ходе выполнения научных исследований на ионно-пучковом аналитическом комплексе Сокол-3 (УНУ №45), построенном на базе электростатического генератора Ван де Грааффа ЭСУ-2.

[1] Schmidt B., Wetzig K. Ion beams in material proceeding and analysis. Springer: Wien. 2013. 418 p.

[2] Johanson S.A.E., Campbell J.L. and others. Particle induced X-ray emission spectrometry (PIXE). Wiley: New York. 1995. 451 p.

[3] Tirira J., Serruys Y. and others. Forward recoil spectrometry, application to hydrogen determination in solids. Plenum Press: New York. 1996. 440 p.

[4] Bird J.R., Williams J.S. Ion beams for material analysis. Academic Press: Sydney. 1989. 721 p.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ТОМОГРАФИЯ: ОТ СХЕМЫ ИЗМЕРЕНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ РЕКОНСТРУКЦИИ ЧЕРЕЗ ВЫБОР ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Ингачева А.С.[1], Чукалина М.В.[1], Бузмаков А.В.[1], Гладков А.П.[2], Асадчиков В.Е.[1]

[1] Институт кристаллографии им А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] ООО «Визиллект Сервис», Москва

e-mail: ingacheva@gmail.com

Компьютерная томография находит своё применение как в научных исследованиях, так в медицине, и различных отраслях промышленности. В докладе рассматривается возможность подбора параметров модели измерения для получения наилучших результатов томографического восстановления. Это важно, поскольку во время экспериментов, которые могут длиться несколько часов, вероятны изменения, как геометрических параметров измерительных схем, так и условий измерения. Например, может происходить медленное смещение положения пятна рентгеновского источника, наклон образца и (или) оси его вращения. В работе показано, что перед применением какого-либо алгоритма томографической реконструкции следует предобработать проекционные данные для повышения качества получаемых изображений. При этом можно скорректировать синограмму, в соответствии с априорными данными о возможных отклонениях геометрии эксперимента от заданной в программе реконструкции. Предполагается способ поиска и коррекции скрытых искажений геометрии эксперимента по инвариантам реконструкции (в частности возможно сравнение между собой реконструкций полученных при диапазонах углов измерения 0-180 градусов и 180-360 градусов)[1].

Работа выполняется при поддержке УМНИК 15-11 № 9679ГУ/2015 (код 0018999).

[1]. Dmitry Nikolaev, Alexey Buzmakov, Marina Chukalina, Yakimchuk Ivan, Andrey Gladkov, Anastasia Ingacheva. CT Image Quality Assessment based on Morphometric Analysis of Artifacts. International Conference on Robotics and Machine Vision (ICRMV 2016), September 14-16, 2016, Moscow, Russia (in press).

ЭВОЛЮЦИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛЕ ТИТАНАТА БАРИЯ В ПРОЦЕССЕ ЦИКЛИЧЕСКОГО НАГРЕВА

Ильина Т.С.[1], Киселев Д.А.[1], Сергеева О.Н.[2], Малинкович М.Д.[1]

[1] Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва

[2] Тверской государственный университет, г. Тверь

e-mail: iltany94@mail.ru

С момента появления сканирующей зондовой микроскопии, работающей в режиме силовой микроскопии пьезоэлектрического отклика, стало возможным наблюдение доменной структуры сегнетоэлектрических материалов, в том числе в широком температурном интервале, при этом не разрушая образец.

В работе представлены результаты визуализации доменной структуры кристалла $BaTiO_3$ в режимах *ex-situ* и *in-situ* при охлаждении из пара- в сегнетоэлектрическую фазы. Топография и изображения доменной структуры кристаллов титаната бария одного и того же участка поверхности исследовались методом силовой микроскопии пьезоотклика (PFM) на сканирующем зондовом микроскопе MFP-3D SA (Asylum Research, США), оборудованным температурной приставкой. Измерительный температурный интервал от -16 ºС до +130 ºС включал 2 фазовых перехода: 1) орторомбическая фаза (*mm*) – тетрагональная фаза (4*mm*) (~ 5 ºС); и 2) тетрагональная фаза (4*mm*) – кубическая фаза (*m*3*m*) (~120 ºС). На рис. 1 показаны изображения доменной структуры для трех различных температур. После охлаждения из параэлектрической фазы («нулевой» контраст, рис 1.а) наблюдается четкий сигнал, свойственный *a* и *c* доменам в $BaTiO_3$ (рис. 1б). При последующем охлаждении до -16 ºС и нагреве до 25 ºС (рис. 1в) доменная структура заметно отличается от исходной, полученной при 40 ºС: произошло увеличение числа *a* доменов и изменение формы *c* доменов. В работе обсуждаются механизмы трансформации доменной структуры при фазовых переходах.

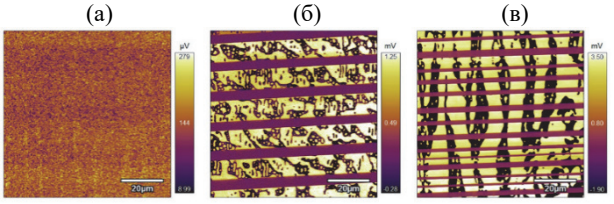


Рис.1. Эволюция доменной структуры в кристалле BaTiO3 от температуры измерения.

МОДЕРНИЗАЦИЯ МОНОКРИСТАЛЬНОГО НЕЙТРОННОГО ДИФРАКТОМЕТРА МОНД НА РЕАКТОРЕ ИР-8

Исакова Н.Н., Мирон Н.Ф.
НИЦ «Курчатовский институт»

Модернизация пятикружного монокристального нейтронного дифрактометра МОНД с однопозиционным гелиевым детектором проведена с целью снижения затрат времени на сбор репрезентативного массива дифракционных данных. Она включала следующие этапы:

- замена однопозиционного гелиевого детектора двухкоординатным позиционно-чувствительным детектором mar345 (пр-во MarXperts G.m.b.H.);
- замена двойного монохроматора его усовершенствованным вариантом;
- усиление защиты детектора для подавления фонового нейтронного и гамма – излучения;
- оснащение дифрактометра МОНД новым гониометром.
- формирование узкого пучка нейтронов круглого сечения с использованием коллимирующих диафрагм переменного сечения.

Приведены результаты экспериментов, выполненных на модернизированном дифрактометре МОНД.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ КАЧЕСТВА РЕЗУЛЬТАТОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДАМИ РИТВЕЛЬДА

Канаки А.В., Кодесс Б.Н.
ФГУП «ВНИИМ», г. Москва
e-mail: kodess@mail.ru

На результаты вычислений структурных характеристик и данных о микро- или макроструктуры анализируемых веществ по программам, использующим методы Ритвельда, влияют ряд вводимых упрощений, качество исходной структурной модели и используемых алгоритмов. Для учета разнородных типов неопределенностей необходимы специализированные типы стандартные образцов (СО). Представлены результаты исследования веществ с различным типом химической связи и сложностью определения структурных характеристик, и с различным уровнем размеров ОКР и микроискажений. Первичный межлабораторный эксперимент для отобранных партий показал высокий уровень повторяемости (сходимости) и воспроизводимости результатов, что позволило аттестовать часть образцов в качестве СО и предложить их для более широкого межлабораторного эксперимента с целью дальнейшего повышения точности и достоверности определяемых характеристик. Микроструктурные характеристики купрата иттрия бария, и высокопрочной стали определены методами Ритвельда и методами Холла-Виллимсона и Халдера с использованием различных групп отражений (соответствующих различным кристаллографическим ориентациям). Для учета инструментальной формы профилей брэгговских отражений использованы аттестованные образцы, содержащие элементы с различным атомным весом - порошки кремния и гексаборида лантана.

Также ФГУП «ВНИИМС» предлагает для участия в расширенном межлабораторных экспериментах вещества с другими типами химической связи и симметрией элементарной ячейки - оксиды алюминия (которые также используются и в качестве добавок в традиционных методах на основе «корундового числа»), стехиометрические и нестехиометрические силициды и германиды и другие сплавы. Эти СО позволяют аттестовывать разнообразные методики измерения структурных характеристик, а также использовать их при поверке дифрактометров и при сдаче-приемке продукции.

ДИФРАКТОМЕТР ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА РЕАКТОРЕ ИР-8 НИЦ “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Карпов И.Д.[1], Балагуров А.М.[2], Глазков В.П.[1],
Мирон Н.Ф.[1], Соменков В.А.[1], Сумин В.В[2],
Шушунов М.Н.[1], Эм В.Т.[1]

[1] Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

[2] Объединённый институт ядерных исследований (ОИЯИ), Дубна, Россия

Благодаря сравнительно большой проникающей способности нейтронов в большинстве материалов дифракция нейтронов является единственным неразрушающим методом, позволяющим измерить распределение напряжений в массивных объемных материалах.

В данной работе рассмотрено как была решена проблема создания современного светосильного стресс-дифрактометра на реакторе ИР-8, НИЦ “Курчатовский институт”.

В результате расчетов и экспериментов была предложена и реализована оригинальная схема монохроматизации нейтронов, в которой в качестве первого монохроматора используется пиролитический графит (PG) с отражающей плоскостью (002) и углом рассеяния $2\theta_{M1}= 26.9^0$, а в качестве второго – фокусирующий изогнутый идеальный монокристалл кремния с отражающей плоскостью (220) и $2\theta_{M2} = 47.9^0$. Выбрана длина волны нейтронов λ = 1.56Å, которая соответствует минимуму полного сечения нейтронов вблизи брэгговского скачка 311 в ферритной стали. Эта длина волны удобна также тем, что угол рассеяния для металлов, наиболее широко используемых в промышленности (Fe, Ni, Al, Cu, Cr), находится вблизи 90^0. При длине волны λ =1.56 Å для двойного монохроматора PG002/Si220 угол между осью канала и монохроматичным нейтронным пучком $\varphi = 21^0$, что позволяет компактно разместить прибор (0.9м от оси канала в одну сторону и 0.7м в другую) и установить монохроматор близко (0.45м) к стенке реактора. По сравнению с однокристальным монохроматором интенсивность в такой схеме примерно в 2 раза выше при том же разрешении.

Созданный на ИР-8 прибор при мощности реактора 6 МВт по разрешению и светосиле сопоставим с современными стресс-дифрактометрами на более мощных реакторах.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ КРЕМНИЕВЫХ И ГЕРМАНИЕВЫХ НАНОЧАСТИЦ, ФОРМИРУЕМЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

Кашаев Ф.В.[1], Заботнов С.В.[1,2], Каменских И.А.[1,2],
Каминская Т.П.[1], Павликов А.В.[1], Лебедев А.М.[2],
Чумаков Р.Г.[2], Велигжанин А.А.[2], Головань Л.А.[1]

[1] Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

[2] НИЦ “Курчатовский институт”

e-mail:kashaev.fedor@gmail.com

Интерес ученых к исследованию наноразмерных структур обусловлен широкими возможностями их использования в оптоэлектронике, нанофотонике и биомедицине. Одним из перспективных способов наноструктурирования является метод импульсной лазерной абляции, обеспечивающий химическую чистоту процесса, а также возможность изменения структурных, оптических и электронных свойств, получаемых наночастиц путем варьирования условий абляции (таких как вид буферной среды, давление среды) [1].

В данной работе монокристаллический кремний и германий облучались лазерными импульсами фемто - и пикосекундной длительности (180 fs и 30 ps). Абляция происходила в различных газовых (гелий, азот) и жидких (вода) средах.

Представляется интересным определение и сравнение структурных свойств, полученных наночастиц кремния и германия. Определение размеров частиц становится возможным с использованием атомно-силовой микроскопии. На рис.1 представлена гистограмма распределения по размерам кремниевых наночастиц, сформированных методом фемтосекундной лазерной абляции в гелии при давлении 700 mbar. Фазовый состав данных наноструктур определяется при помощи спектроскопии комбинационного рассеяния света. Полученные результаты исследований согласуются с данными рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, а также с данными малоуглового рентгеновского рассеяния.

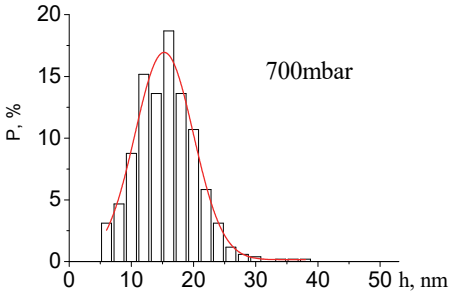


Рис.1. Распределение по размерам наночастиц, сформированных при абляции в гелии.

Работа поддержана грантом РФФИ №14-22-01086

[1] Макаров Г.Н. // УФН, 2013, том 183, № 7, с. 673-718.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ СИНХРОТРОННЫЙ СПЕКТРОМЕТР EXAFS-D НА КАНАЛЕ 6.2 НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Князев Г.А.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: miem.knyazev@mailx.ru

Данная станция располагается на канале 6.2 Курчатовского источника синхротронного излучения. Станция предназначена для получения EXAFS–спектров в дисперсионной моде.

EXAFS – важный инструмент для исследования материалов, так как знание локальной атомной структуры жизненно необходимо во многих областях науки, таких как химия, электроника, геофизика, металлургия, материаловедение. Дисперсионный метод исследования использует полихроматическое излучение, выделенное из белого пучка СИ изогнутым кристаллом. Главным преимуществом энергодисперсионной методики является отсутствие механического движения монохроматора во время измерения спектра, обуславливающее возможность использования коротких времен экспозиций (десятки миллисекунд). Этому так же способствует высокая светосила метода, при котором фотоны всех энергий спектра регистрируются одновременно. Совокупность этих обстоятельств позволяет проводить исследования быстропротекающих процессов в режиме «on line».

Так же на станции реализована методика дифракция Дебая–Шеррера в геометрии прямого и обратного рассеяния.

Новый детектор позволяет быстро получать картины дифракции. А важнейшей особенностью станции является возможность точно настраивать энергию излучения в широком диапазоне. Это позволяет подойти к рассеянию назад ($2\theta = 180°$) настолько близко, насколько это обусловленно геометрией эксперимента, и многократно (в сотни раз) повышает чувствительность метода. Развитый метод найдет применение в исследованиях материалов, подвергнутых различным воздействиям – экстремальным температурам, облучению, легированию, при наличии остаточных напряжений.

ИСПЫТАНИЯ ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ

Кодесс Б.Н., Исаев Л.К.

ФГУП «ВНИИМС», Росстандарт, г.Москва

Метрологическое обеспечение передачи знаний в новые технологии осуществляется за счет разработки, уточнения и аттестации традиционных и новых методик измерения с использованием эталонных средств измерений, обеспечивающих повышение качества результатов измерений состава и свойств веществ. Дифрактометрические методы дают возможность всесторонней и глубокой характеризации кристаллов на всех уровнях строения вещества (от электронного и атомного масштаба до наноструктурного, микро- и макроструктурного). Диапазоны, в которых находятся определяемые значения метрологических характеристик, должны быть установлены в ходе испытаний каждого типа дифрактометров. Дифрактометры включают несколько компонент, которые дают разнонаправленный вклад в неопределенность (погрешность) конечных результатов определения состава и свойств, в тоже время ранее испытания проводились, как правило, по усеченной неполной программе для одного из компонент этой измерительной системы. В результате для большей части результатов измерений достоверность и точность остаются не выясненными.

Для полных испытаний в России (ФГУП «ВНИИМС») создана система стандартных образцов (СО) на основе дифракционных свойств. Описаны три первых комплекта СО дифракционных свойств. Они учитывают требования к индивидуальному набору СО, который зависит от назначения дифрактометров и сфер применения. Результаты, получаемые на аттестованном оборудовании, обеспечивают возможность выпуска надежной продукции. Более высокое качество позволяет также оптимизировать научные разработки за счет воспроизводимости результатов определения структурных характеристик.

[1]. Б.Н.Кодесс Метрологическое обеспечение высокоточных измерений характеристик ключевых материалов современных технологий и их стандартные образцы состава и свойств. История науки и техники (2010) №9, стр. 29-36.

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ФЛЮОРИТ-ПИРОХЛОР В ОКСИДЕ $Eu_2Hf_2O_7$ С ПОМОЩЬЮ АНОМАЛЬНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Колышкин Н.А.[1], Велигжанин А.А.[1], Зубавичус Я.В.[1], Попов В.В.[2]

[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*

[2] *НИЯУ МИФИ*

e-mail: nickelprog@mail.ru

Сложные оксиды с формулой $Ln_2M_2O_7$ (Ln – лантаноид, M – Hf, Zr) при определённой температуре (обычно ~600 – 700 °C) кристаллизуется в структуру типа флюорит, а при дальнейшем её повышении до ~1200 – 1500 °C – в структуру типа пирохлор. Возможность образования той или иной структуры связана с соотношением радиуса катионов r_{Ln}/r_M, причём при соотношении порядка 1,5 вещество может образовывать как флюоритную, так и пирохлорную фазу. Переход в пирохлорную фазу сопровождается катионным и анионным упорядочением, и, как следствие, появлением сверхструктурных рефлексов на дифрактограммах рентгеновского рассеяния.

Для вещества $Eu_2Hf_2O_7$ возможно образование как фазы типа флюорит, так и фазы типа пирохлор. Однако, относительная близость атомных факторов рассеяния Eu и Hf приводит к трудностям при наблюдении сверхструктурных пирохлорных рефлексов. Аномальная (или резонансная) рентгеновская дифракция решает эту проблему, подчёркивая атомный контраст вблизи краёв поглощения одного из атомов в составе вещества.

Чтобы проанализировать структурный переход флюорит → пирохлор для $Eu_2Hf_2O_7$ было произведено моделирование резонансной дифракции вблизи L3-края гафния. В специально написанной на языке Delphi программе были проведены расчёты спектров интенсивности Icalc(E) с вариацией трёх параметров. Эти параметры соответствуют упорядочению катионов Hf и Eu, заселенности кислородных вакансий и положению кислорода 48f и, таким образом, характеризуют переход флюорит → пирохлор. Полученные таким образом зависимости интенсивности рефлексов от энергии сравнивались с экспериментально измеренными на станции «Структурное материаловедение» Iexp(E) по критерию Пирсона и по двум критериям. Оценка параметров структуры указывает смешение флюоритной и пирохлорной фаз в исследуемом оксиде.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР С СОСТАВНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМОЙ РЕНТГЕНОВСКИМИ МЕТОДАМИ

Кондратьев О.А.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Галиев Г.Б.[2,3], Имамов Р.М.[2], Просеков П.А.[1,2], Пушкарев С.С.[2,3], Серегин А.Ю.[1,2]

[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*

[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[3] *ИСВЧПЭ РАН*

oa.kondratev@physics.msu.ru

Для изготовления электронных приборов, работающих в диапазоне 100–300 ГГц, требуется высокая концентрация электронов в квантовой яме, что может быть достигнуто с использованием тонких кристаллических вставок. В рамках работы проведено исследование HEMT-структур $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ с наноразмерной вставкой InAs в квантовой яме комплексом рентгеновских методов, включающим рефлектометрию, двухкристальную дифрактометрию и сканирование обратного пространства.

В таблице 1 приведена технологически заданная структура исследуемых образцов. Методом рентгеновской рефлектометрии определены параметры слоистой модели исследуемых образцов (толщина, электронная плотность слоя, неидеальность верхней межслоевой границы), восстановлены профили распределения электронной плотности. Методом дифрактометрии (рис. 1) проведен анализ согласования решеток буферного слоя и подложки; уточнен состав и степень релаксации буферного слоя.

Полученные данные показали весьма близкое, в пределах 5%, соответствие реальных параметров структуры технологически заданным; позволили провести структурную диагностику исследуемых многослойных систем, что позволяет корректировать и совершенствовать технологию выращивания HEMT-наногетероструктур.

Слой	Состав	Толщина, нм
защитный слой	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	5.2
барьер	$In_{0.52}Al_{0.48}As$	14.5
легирующий δ-слой	Si	–
спейсер	$In_{0.52}Al_{0.48}As$	4.3
(КЯ)	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	16
	InAs (17, 21, 30Å)	
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	
буфер	$In_{0.52}Al_{0.48}As$	400
подложка	InP	–

Таблица 1. Слоистая модель исследуемых образцов.

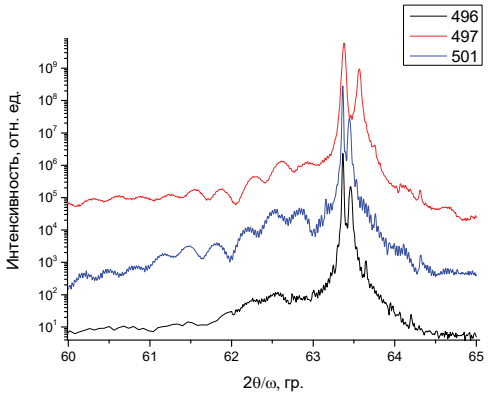


Рис. 1. Рентгенодифракционные кривые исследуемых образцов. Рефлекс (004), излучение CuK_{a1}.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты РФФИ № 16-32-00757 мол_а, 16-29-14057 офи_м). Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, на синхротронной станции «РКФМ» НИЦ «Курчатовский институт».

УПРАВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРАМИ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ТЕМПЕРАТУРНЫМ ГРАДИЕНТОМ

Кочарян В.Р.
Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения
Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация
e-mail: Vahan2@yandex.ru

В ИППФ НАН РА под действием температурного градиента или ультразвуковых колебаний впервые наблюдалось явление полной переброски рентгеновских лучей из направления прохождения в направление отражения и уменьшение коэффициента поглощения в монокристаллах кварца, можно контролировать рабочие параметры отраженного излучения в пространстве и во времени и преобразовывать сферическую волну в плоскую.

С этой целью экспериментально исследованы и теоретически рассмотрены принципы и закономерности отражения жесткого рентгеновского излучения от кристалла кварца в геометрии Лауэ под влиянием температурного градиента в диапазоне выше 30 кэВ.

В качестве исследуемых образцов были использованы образцы (30х30мм^2) монокристалла кварца с толщинами 6 и 9мм. В ходе работ экспериментально рассмотрена фокусировка, спектр и интенсивность отраженного рентгеновского излучения 30кэВ и 40кэВ из отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ при температурном градиенте.

Показано, что при энергиях рентгеновского излучения 30 и 40 кэВ для отражающих атомных плоскостей $(10\,\bar{1}\,1)$ монокристалла кварца с Х–срезом в зависимости от величины температурного градиента можно управлять рабочими параметрами отраженного пучка: интенсивность отраженного пучка увеличить на порядках, выделить пучок с большой угловой и спектральной шириной и перебросить в направлении отражения, фокусировать и изменять фокусное расстояние.

ДИФРАКЦИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНОМ ГРАДИЕНТЕ

Кочарян В.Р.[1,2], Вагнер А.Р.[2], Мовсисян А.Е.[1]
[1] Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения
[2] Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация
e-mail: movartur@gmail.com

Впервые в работе [1] экспериментально при дифракции Лауэ геометрии от отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца наблюдается явление полной переброски пучков тепловых нейтронов из первичного направления в направлении отражения при наличии температурного градиента. В работе [2] теоретически анализирован явления дифракции нейтронного пучка в монокристаллах под внешним воздействием (акустические колебания и температурный градиент) в Лауэ геометрии.

Настоящая работа посвящена исследованию процесса дифракции тепловых нейтронов. В ходе работ показано, что с уменьшением кривизны отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца, интенсивность отраженного пучка тепловых нейтронов увеличивается, достигая максимального значения, и в дальнейшем медленно уменьшается. Так как поглощение тепловых нейтронов намного меньше в монокристалле кварца, то с помощью приложенного температурного градиента или акустического поля на монокристалл кварца с толщиной несколько см, становится возможным от первичного пучка отделить пучок нейтронов с большой спектральной и угловой шириной и перебросить в направлении отражения.

[1] А.Р. Мкртчян, Л.А. Кочарян, М.А. Навасардян и др. Изв. АН Армянской ССР, Физика, т.21, вып. 5, сс. 287–289, 1986.

[2] А.Р. Мкртчян, Р.Г. Габриелян,О.А. Унанян, А.Г. Бегларян. Изв. АН Армянской ССР, Физика, т.21, вып. 6, сс. 313–316, 1986.

МОДУЛЯЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА С ВНЕШНИМ АКУСТИЧЕСКИМ КОЛЕБАНИЕМ

Кочарян В.Р.[1,2], Мурадян Т.Р.[1]
[1] *Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения*
[2] *Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация*
e-mail: tigran.muradyan.86@mail.ru

В ИППФ НАН РА были проведены исследования, посвященные управлению в пространстве и во времени параметрами рентгеновского пучка на разных отражающих атомных плоскостях монокристалла кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ, когда в кристалле возбуждены объемные акустические волны. Показано, что в монокристалле кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ, объемные акустические волны приводят к пространственной модуляции дифрагированных пучков, т.е. во фронтальном сечении, в зависимости от порядка гармоники возбуждения акустического поля возникают m=n+1 полосы интенсивности, где n – порядок гармоники и принимает нечетные значения, т.е. число полос интенсивностей в фронтальном сечении четное.

С целью получения модулированных полос с любим (четным и нечетным) числом на фронтальном сечении рентгеновского пучка в данной работе экспериментально рассмотрен отражение рентгеновского излучения от отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ при наличии объемных акустических волн. В эксперименте использовалась двухкристалльная (n,-n) Лауэ схема, оба монокристалла представляли собой шайбо-образные пластинки кварца толщиной 1.7 мм, у которых частоты возбуждении акустических волн почти идентичны. Показано, что при возбуждении первого кристалла разными порядками резонансной частоты число полос в поперечном сечении отраженного рентгеновского пучка получается четным, а при возбуждении второго кристалла при той же резонансной частоте, число полос получается нечетным.

Таким образом, получается, что можно модулировать рентгеновский пучок и управлять рабочими параметрами: число полос на фронтальном сечении изменяется с порядком резонансной частоты, а расстоянием между полосами и их шириной можно управлять амплитудой акустического колебания.

ЯКР ^{35}Cl В ИССЛЕДОВАНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КЛАСТЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ С АНИОНАМИ $[B_{10}Cl_{10}]^{2-}$

Кравченко Э.А.[1], Вологжанина А.В.[2], Авдеева В.В.[2], Малинина Е.А.[2], Кузнецов Н.Т.[2], Улитин Е.О.[3], Гиппиус А.А.[3,4]
[1] *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*
[2] *Институт элементоорганических соединений им. Н.А. Несмеянова РАН*
[3] *МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет*
[4] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: gippius@mail.ru

Известно, что вторичные межмолекулярные взаимодействия в высших кластерных боратах играют важную структурообразующую роль, в значительной степени определяя их химические свойства. И хотя критерием при выявлении вторичных взаимодействий служат вдВ радиусы, однозначного выбора системы их величин не существует. Поэтому для решения вопроса о том, есть ли химическая связь между атомами, расположенными на «укороченных» расстояниях необходим инструмент, который способен выявить тонкие возмущения электронной плотности при образование вторичных химических связей. Таким инструментом является спектроскопия ЯКР ^{35}Cl: вовлечение химически эквивалентных атомов Cl во вторичные взаимодействия приводит к их кристаллографической неэквивалентности и, как следствие, к расщеплению спектров ЯКР.

Методом РСА определены структуры декахлоро-*клозо*-декаборатов типа $Cat_x[B_{10}Cl_{10}].ySlv$, (Cat = катион, Slv = молекула растворителя). Данные РСА сопоставлены с результатами исследования этих соединений методом ЯКР ^{35}Cl, что позволило выбрать из всего массива найденных межатомных расстояний те, которые обусловлены тонкими изменениями в электронном распределении из-за образования вторичных связей в исследованных соединениях (Cl…H–C, Cl…H–N, Cl…C[1]). В водных сольватах декахлоро-*клозо*-декаборатов со щелочными катионами ($K_2[B_{10}Cl_{10}].3H_2O$, $Cs_2[B_{10}Cl_{10}].0.5H_2O$, $Cs_2[B_{10}Cl_{10}].H_2O$) также обнаружены вторичные связи B–Hal...H. Спектры ЯКР ^{35}Cl, однако, указали на отсутствие в них взаимодействий K…Cl (Cs…Cl), хотя результаты РСА обнаружили большое число контактов K(Cs)…Cl, укороченных по сравнению с суммой соответствующих вдВ радиусов.

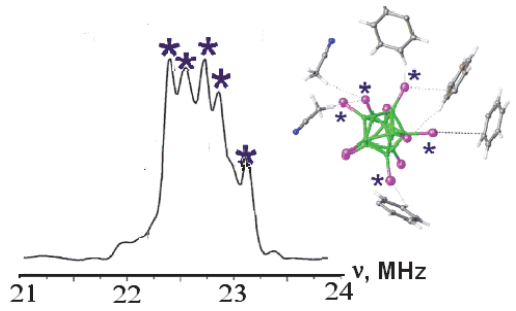


Рис.1. Спектр ЯКР ^{35}Cl и фрагмент структуры $[Ph_4P]_2[B_{10}Cl_{10}]$.

[1] Kravchenko E.A., Gippius A.A., et al., // Inorg. Chim. Acta, 2016, v.447 , p.22-31.

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЧИВОСТИ РЕШЕНИЙ ПРИ АНАЛИЗЕ ПОЛИДИСПЕРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

Крюкова А.Е., Конарев П.В., Волков В.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: alenka3112007@ya.ru

Метод малоуглового рассеяния (МУР) является эффективным структурным методом, позволяющим исследовать поведение в растворах сложных многокомпонентных полидисперсных объектов. Так, в работе [1] был изучен температурный переход от сферических к цилиндрическим мицеллам АОТ микроэмульсий.

Для анализа такого рода объектов нами ранее была разработана программа MIXTURE [2], позволяющая моделировать многокомпонентные системы, содержащие различные типы полидисперсных частиц и учитывающая межчастичные взаимодействия.

Для оценки устойчивости решений от таких систем по данным малоуглового рассеяния нами было проведено моделирование на теоретических наборах данных, которые были рассчитаны с помощью MIXTURE. Затем параметры, описывающие систему, случайным образом изменялись и исследовалась возможность восстановления правильного решения программой MIXTURE. Были получены оценки диапазона для параметров, при которых восстановление возможно. Кроме того, к наборам данных добавлялся шум с различным относительным уровнем и определялся пороговый уровень шума, при котором восстановление параметров системы еще было возможно. По результатам проведенного моделирования выработаны практические рекомендации, как для пользователей программного обеспечения, так и для модернизации алгоритмов поиска решения.

[1] Svergun D.I., Konarev P.V. et.al.. // Journal of Chemical Physics, 2000, V. 113, p. 1651-1665.

[2] Konarev P.V., Volkov V.V. et.al. // Journal of Applied Crysrallography, 2003, V. 36, p. 1277-1282.

БЕЛОК ОБОЛОЧКИ ПОТИВИРУСА КАРТОФЕЛЯ А ОБРАЗУЕТ IN VITRO НЕОБЫЧНЫЕ КОРОТКИЕ ВИРУСОПОДОБНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Ксенофонтов А.Л.[1], Добров Е.Н.[1], Фёдорова Н.В.[1], Голаников А.Е.[2], Штыкова Э.В.[2]
[1] НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского МГУ, Москва,
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: ksenofon@belozersky.msu.ru

Потивирусы являются самой крупной и наиболее экономически важной группой вирусов растений. Структурный анализ белка оболочки (БО) потивируса картофеля А (АВК) в растворе проводили методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР), флуоресцентной спектроскопией и электронной микроскопией. Общие структурные характеристики БО АВК, полученные МУРР (радиусы инерции, объемы, молекулярные массы), ясно указывают на образование крупных частиц, содержащих десятки (~ 60) отдельных макромолекул БО. Графики Порода и Кратки указывают на существование довольно компактных плотных частиц при pH 7,8, и наличие частично разупорядоченных тел при pH 10,5. *Ab initio* реконструкция формы частиц, состоящих из БО, при pH 7,8 демонстрирует цилиндрические ассоциаты, аналогичные по форме вириону АВК. Эти частицы претерпевают значительные изменения с ростом pH до10.5: они теряют свою компактность и разделяются на слабо соединенные сферические фрагменты. Результаты электронной микроскопии также показывают, что БО АВК при pH 7,8 собирается в короткие цилиндрические вирусоподобные частицы, тогда как при pH 10,5 БО образует сферические частицы с диаметром 20-30 нм. Спектры флуоресценции и интактных вирионов АВК и изолированного БО АВК при pH 7,8 имеют два максимума при 314 и ~ 330 нм, т.е. эти образцы имеют сходные третичные структуры. Спектр флюоресценции изолированного БО АВК в буфере с pH 10,5 имеет единственный максимум при 343 нм. Сдвиг максимума от 330 до 343 нм отражает потерю третичной структуры. В целом, результаты данной работы показывают, что самосборка БО АВК в буфере с pH 7,8 является природным свойством белка оболочки АВК, необходимым для формирования вирусной оболочки. Работа поддержана РФФИ (15-04-01406а).

ИЗГИБНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ МОНОЛИТНЫХ БИМОРФНЫХ КРИСТАЛЛОВ НИОБАТА ЛИТИЯ ДЛЯ НЕМЕХАНИЧЕСКОГО УПРАВЛЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИМ ПУЧКОМ

Куликов А.Г., Марченков Н.В., Элиович Я.А., Таргонский А.В., Благов А.Е., Писаревский Ю.В., Ковальчук М.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
E-mail: imegalomanius@gmail.com

На сегодняшний день одним из наиболее актуальных направлений исследований является совершенствование подходов к изучению динамики процессов, происходящих в изучаемых образцах, в частности исследование структуры и свойств материалов, подвергающихся внешним воздействиям. Ключевым моментом в проведении подобных исследований является скорость управления параметрами эксперимента, т.е. высокое временное разрешение.

Традиционно применяемые для этих целей механические системы обладают недостаточным быстродействием. В качестве замены механическим системам в лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения Института кристаллографии им. А.В. Шубникова разрабатываются адаптивно-управляемые рентгенооптические элементы на основе резонаторов на продольных акустических волнах [1]. Однако их использование ограничено использованием геометрии Лауэ, малым диапазоном изменения параметра решетки и, как следствие, углового положения рентгеновского пучка.

В работе [2] впервые предложен и успешно испытан безгистерезисный управляемый элемент на основе монолитного биморфного пьезоактуатора. Была реализована управляемая перестройка углового положения рентгенооптического элемента в статическом режиме, характеризуемая строгой линейностью сдвига кривой дифракционного отражения (КДО), воспроизводимостью и относительно невысокими управляющими напряжениями. Пьезоактуатор изготовлен из кристалла ниобата лития ($LiNbO_3$), отожженного специальным образом для образования двух доменов с противоположными направлениями поляризации по толщине. Данный факт приводит к возникновению изгибной деформации при воздействии на элемент внешнего электрического поля и позволяет существенно увеличить диапазоны угловой перестройки. Бидоменные элементы были разработаны сотрудниками Московского института стали и сплавов и института кристаллографии.

В настоящей работе продемонстрирован резонансный режим работы данного элемента в качестве адаптивного монохроматора. В таком режиме удалось добиться существенно больших по сравнению со статическим режимом амплитуд изменения углового положения рентгеновского пучка вплоть до 400 угл. сек. в зависимости от параметров элемента и резонансной моды, что позволило осуществить простейший модельный эксперимент по измерению спектра рентгеновской трубки с молибденовым анодом. При записи спектра трубки использовался многоканальный анализатор, который позволяет разделять период электрического сигнала по каналам и записывать интенсивность дифрагированного излучения в соответствии с фазой сигнала. Каждой фазе колебания изгибного элемента соответствует своя длина волны излучения. Таким образом, при использовании высокоинтенсивного синхротронного источника, использование бидоменных изгибных элементов позволяет осуществлять быстрое сканирование по энергии (например, в экспериментах по спектроскопии), либо записывать КДО образца за считанные миллисекунды.

[1] Ковальчук М.В., Таргонский А.В. и др. Кристаллография, 2011, том 56, № 5, с 886-889.

[2] Благов А.Е., Быков А.С. и др.Электромеханические рентгенооптические элементы на основе безгистерезисных монолитных биморфов// ПТЭ, 2016 г., № 5, стр. 109-114.

АНАЛИЗ ВТПСП-ЛЕНТ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ И ИХ ОТДЕЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ РЕНТГЕНОВСКИМИ МЕТОДАМИ

Лихачёв И.А., Пашаев Э.М., Гурьев В.В., Шавкин С.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: likhachev82@mail.ru

Значительный прогресс в технологии ВТСП-2 сверхпроводников, произошедший за последние 15 лет, обуславливает повышенный интерес к плоским сверхпроводящим системам из-за их важного научного и технологического значения. Подобные объекты обладают рядом нетривиальных электрофизических свойств, на которые существенное влияние оказывает их структура. Кроме того, существуют различные подходы к изготовлению и подбору материалов для подобных образцов.

Данная работа посвящена изучению ВТСП-лент 2-го поколения и отдельных их составляющих с помощью рентгеновских методов.

Текстурированные подложки из различных материалов (CuFe, NiW, NbTi, сталь и др.) были проанализированы методом прямых полюсных фигур: были изучены особенности формирования текстуры с целью оценить возможность использования данных материалов для изготовления ВТСП-лент, определены преимущественные ориентировки поликристаллов в образцах, проанализировано их влияние на выращенные на подложках слои.

Для текстурированных подложек на основе NbTi была иссследована взаимосвязь их магнитных и структурных свойств. Полученные двумерные дифрактограммы были использованы для анализа текстуры и интегрированы к стандартной форме для обработки методом Ритвельда.

Для ВТСП-ленты 2-го поколения было проанализировано влияние текстуры стальной подложки на распределение преимущественных ориентировок кристаллитов в буферных слоях YSZ (yttria stabilized zirconium) и CeO_2 различной толщины и в текстурированном сверхпроводящем слое $YBa_2Cu_3O_{7-x}$. Были изучены структурные особенности лент сталь/YSZ/CeO_2/YBCO и их связь с электрофизическими и сверхпроводящими свойствами данных объектов.

Полученные важные научные и прикладные результаты показали важность рентгеновских методов анализа для исследования новых сверхпроводящих материалов.

НЕЛИНЕЙНАЯ УПРУГОСТЬ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Луговской А.В.[1,2], Красильников О.М.[1], Векилов Ю.Х.[1,2]
[1] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
[2] Лаборатория моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС»
e-mail: andrey.lugovskoy@gmail.com

При больших степенях сжатия (давление сопоставимо с величиной объемного модуля) кристаллическая решетка может стать неустойчивой к однородным сдвиговым деформациям, что приводит к появлению менее симметричных структур (деформационные фазовые переходы). Параметром порядка при таких переходах являются компоненты тензора конечных деформаций. Устойчивость фаз высокого давления определяется нелинейной упругостью решетки (упругими постоянными третьего, четвертого и т.д. порядка). Для кубической и гексагональной структур рассмотрены различные случаи потери устойчивости при гидростатическом давлении. Приведен критерий, определяющий при каком соотношении между упругими постоянными второго, третьего и четвертого порядка возможен деформационный переход первого рода. Скачок параметра порядка и величина потенциального барьера при переходе определяются упругими постоянными третьего и четвертого порядка. В качестве примера проанализирован экспериментально наблюдаемый деформационный переход в ванадии при давлении P≈ 69 ГПа из ОЦК в ромбоэдрическую фазу и рассмотрены возможные структурные превращения в ОЦК – молибдене и вольфраме при P≥700 ГПа. Дан анализ устойчивости ГПУ – рутения в интервале давлений 0÷600 ГПа. Необходимые значения упругих постоянных различного порядка вольфрама, молибдена и рутения в широком интервале давлений рассчитаны в рамках теории функционала плотности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант16-02-00699) и Министерства образования и науки (грант 14.Y26.31.0005). Вычисления проводились на компьютерном кластере «Черри», предоставленной Лабораторией моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС».

НИТРИДНЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОНОВ: ТЕХНОЛОГИЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОКОВЫХ СОСТОЯНИЙ

Майборода И.О., Гричук Е.С., Валеев В.Г., Занавескин М.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: mrlbr@mail.ru

Применение транзисторов с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе гетероструктур AlGaN/AlN/GaN позволяет создавать СВЧ устройства, обладающие уникальным сочетанием высоких рабочих частот и высоких удельных мощностей [1]. В процессе изготовления нитридных СВЧ устройств, в частности, нитридных транзисторов с электронами высокой подвижности (HEMT), поверхности гетероструктур и другие интерфейсы подвержены влиянию ряда агрессивных внешних воздействий, которые модифицируют их физические свойства. При этом именно структура внутренних границ системы в реальном пространстве и диктуемая ею электронная структура интерфейсов в существенной степени определяют физические свойства и эксплуатационные характеристики нитридных устройств. Поэтому проблема создания технологии производства подобных объектов сопряжена с необходимостью решения трех взаимосвязанных практических задач: создания в системе мезоскопически однородных и плоских интерфейсов, эффективной пассивации поверхности гетероструктур и формирования оптимальных электрических контактов к ним. Мировая практика отводит существенную роль в решении этих задач предварительному исследованию соответствующих численных моделей.

В настоящей работе на основе системы кинетических уравнений в квазиклассическом приближении построена численная модель HEMT. Уравнения этой модели решаются самосогласованно с учетом геометрии моделируемого устройства и естественных граничных условий. Схема позволяет последовательно учесть особенности морфологического строения и электронной структуры интерфейсов реальных устройств, разрабатываемых в НИЦ «Курчатовский институт».

[1] Stephen W.K., Wong M.H. et al. // Semicond. Sci. Technol., 2013, vol. 28, p. 074001.

КОМПЛЕМЕНТАРНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННОГО, РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ В ОБЛАСТИ НБИКС-ТЕХНОЛОГИЙ

Марченков Н.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: Marchenkov_nv@nrcki.ru

Уникальный комплекс лабораторных рентгеновских установок и электронных микроскопов комплементарно дополняет возможности синхротронного и нейтронного источников и позволяет проводить предварительные эксперименты по отбору образцов и отработке экспериментальных методик с целью реализации дальнейших исследований на установках класса «мега-science». Имеющаяся в НИЦ «Курчатовский институт» обширная приборная база по своим возможностям охватывает практически все существующие рентгеновские и электронномикроскопические, позволяя проводить на одной площадке комплексные, взаимодополняющие исследования и получать с высокой точностью достоверные данные о структуре и свойствах исследуемых объектов на макро-, микро- и наноуровне.

На данном комплексе установок возможна реализация всех основных рентгеновских методик: высокоразрешающей двух- и трехкристальной дифрактометрии, рефлектометрии, рентгеноструктурного, рентгенофазового и рентгенофлуоресцентного анализа, фазочувствительных методов многоволновой дифракции и стоячих рентгеновских волн. Кроме того, интегрированные в программное обеспечение лабораторных установок алгоритмы позволяют в автоматизированном режиме проводить картографирование обратного пространства и измерение полюсных фигур. Что касается электронной микроскопии, экспериментальное оборудование Курчатовского комплекса НБИКС-технологий дает возможность реализовывать метод растровой электронной микросокпии с опцией ионного травления, а также метод сканирующей электронной микроскопии с атомарным разрешением и функцией мгновенной заморозки образцов, необходимой для исследования биологических объектов (клеток, бактерий, вирусов и т.п).

С помощью оборудования Курчатовского комплекса НБИКС-технологий могут быть исследованы совершенно разные образцы, например, монокристаллические и поликристаллические материалы (как неорганические, так и органические, например, белковые кристаллы), наноструктуры, гетероструктуры, кристаллические порошки, многослойные структуры на поверхности жидкости или твердой подложке, тонкие пленки, приповерхностные слои и границы раздела сред, кристаллические дефекты, объекты археологических находок и культурного наследия. Пример проводимых в Курчатовском комплексе НБИКС-технологий исследований представлен на рис. 1.

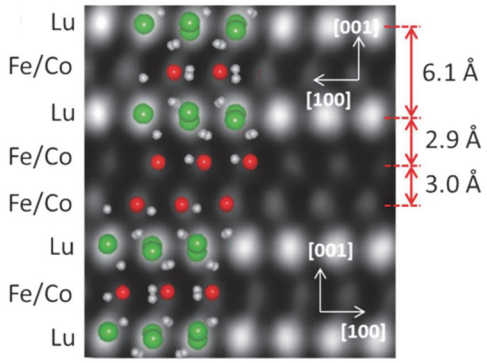


Рис.1. Изображение электронной микроскопии дефектных сдвоенных слоев, возникающих в кристалле $LuFeO_3$ при легировании данного соединения кобальтом, замещающим 30% исходного железа.

ФУНКЦИИ ПЕРЕДАЧИ И ГРАНИЦЫ ЭФФЕКТИВНОСТИ АКТИВНЫХ ВИБРОЗАЩИТНЫХ УСТРОЙСТВ

Мелик-Шахназаров В.А., Стрелов В.И., Софиянчук Д.В., Трегубенко А.А.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
E-mail: kmikran@spark-mail.ru

Для защиты от вибраций технологического и высокоточного измерительного оборудования необходима система активной защиты. Разработаны активные виброзащитные устройства (АВЗУ), состоящие из опорной плиты и, установленной на ней с помощью упругих элементов, несущей плиты с симметрично расположенной группой акселерометров и сервисных движителей, включённых в электрические цепи авторегулирования для подавления шести мод колебаний несущей плиты с установленным на ней защищаемым оборудованием.

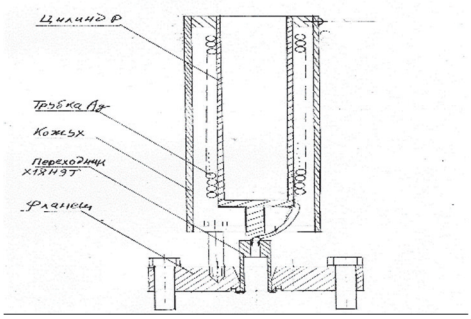
Основные параметры АВЗУ определяются комплексной петлевой функцией передачи (ФП) цепи авторегулирования, которая является произведением ФП следующих звеньев: 1) электрические цепи, 2) механический осциллятор, представляющий собой несущую плиту, установленную на упругих элементах, 3) механические цепи, передающие вибрации на несущую плиту 4) сервисные движители, представляющие собой электродинамические преобразователи, 5) акселерометры.

Электрические цепи представляют собой авторегуляторы, а все остальные звенья разрабатываются в соответствии с заданными параметрами АВЗУ: активный диапазон частот (0,2 – 400) Гц, максимальный коэффициент подавления колебаний ~ 60дБ, масса защищаемого объекта и др. Основные требования к механическим и электромеханическим узлам следующие. Несущая плита при любых условиях, не должна иметь поперечных резонансов, которые ограничивают активный диапазон со стороны высоких частот. Расчёт сервисных движителей должен учитывать явление механоэлектрического резонанса в электродинамических преобразователях, который приводит к искажению ФП в активной области частот. ФП используемых акселерометров определяется заданной границей активного диапазона со стороны низких частот.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА ЧЕРЕЗ МЕМБРАНЫ ИЗ СЕРЕБРА ДЛЯ ФОТОСТИМУЛИРОВАННОЙ ОЧИСТКИ ОПТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ КАНАЛОВ ВЫВОДА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Меньшиков К.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: UVLaser@yandex.ru

В каналах вывода синхротронного излучения большой проблемой является загрязнение углеродом оптических поверхностей. Причина этого - разложение адсорбированных газов, содержащих углерод (CO, CO_2, CH_4 и др.) под воздействием ионизирующего излучения. Известно, что в кислородной атмосфере ионизирующее излучение вызывает обратный эффект: очистку поверхностей от загрязнения углеродом, поскольку образующийся атомарный кислород соединяется с углеродом и уходит с поверхности. Поэтому в сверхвысоковакуумных каналах вывода синхротронного излучения необходимо иметь кислородные натекатели. Обычно такой натекатель представляет собой сложное устройство с трубопроводной системой напуска газа с кислородным баллоном высокого давления. Однако, анализ литературы показал, что имеется простое, в принципе, решение: использование избирательной диффузии кислорода воздуха через серебро при повышенной температуре 500–600 ^{0}C, при этом диффузионный поток пропорционален площади мембраны и обратно пропорционален её толщине. В докладе предлагается конструкция такого натекателя кислорода (см.рис) с потоком $5\cdot10^{-5}$ (л·торр)/с.



Эскиз предлагаемого натекателя

В качестве мембраны предлагается использовать серебряную трубку с толщиной стенки 0,1 – 0,5 мм и диаметром 2-5 мм. С одной стороны, трубка запаивается в переходник, сообщаясь внутренней частью с вакуумируемым объёмом, с другой – герметично запаивается. Внутрь цилиндра длиной 120 мм из нержавеющей стали вставляется стержневой нагреватель. Преимуществом такого натекателя является компактность, простота управления и использование кислорода атмосферы.

[1] Coles R.E. // Brit. J. Appl. Phys., 1963, V.14, 342-344

СПЕЦИАЛИЗИРОВАННАЯ ЯЧЕЙКА КНУДСЕНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СУБМНОНОСЛОЙНЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР, В Т.Ч., НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДА

Меньшиков К.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: UVLaser@yandex.ru

Ячейка Кнудсена используется для напыления различных веществ ещё с начала 20 века [1]. В наших работах возникла необходимость в напылении субмонослойных плёнок фторфуллеренов. Эти материалы весьма дороги, поэтому была выбрана ячейка Кнудсена как наиболее экономичный метод напыления. Ячейка может работать в сверхвысоком вакууме порядка 10^{-9} Торр и обеспечить нагрев испаряемого вещества до 350^{0}C с контролем температуры. При этом удалось максимально уменьшить нагрев других деталей, тепловую инерцию и обойтись без водяного охлаждения.

Ячейка Кнудсена (см. рисунок) базируется на фланце Conflat 2,75” с термопарными выводами под хромель-алюмель. Она консольно расположена на стержне из нержавеющей стали диаметром 2 мм, который служит тепловой развязкой. В ячейку ввинчиваются сменные крышки с различными отверстиями, и она закрыта тепловым экраном. Для нагрева ячейки до 200^{0}C достаточно мощности всего 2 Вт, что легко позволяет напылять плёнки без охлаждения при вакууме $1\cdot10^{-9}$ Торр. Имеется возможность перекрывать пучок с помощью вращающейся заслонки, управляемой внешним постоянным магнитом.

[1] Knudsen M.//Ann. Phys., 1909, V.333, Issue 5, p. 999–1016

[2] Пат. 2471705 РФ / Свечников Н.Ю., Станкевич В.Г., Меньшиков К.А., Лебедев А.М.

ПРИМЕНИМОСТЬ ЭМПИРИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ РАСЧЕТА МОДУЛЯ ЮНГА И КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ГРАФЕНА

Минкин А.С.[1], Попов А.М.[2], Лебедева И.В.[3]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *Институт спектроскопии РАН*
[3] *Universidad del País Vasco UPV/EHU*
e-mail: amink@mail.ru

Адекватность моделирования свойств графена методом классической молекулярной динамики во многом зависит от выбора потенциала межатомного взаимодействия и его параметризации. В данной работе мы сравниваем упругие свойства графена, рассчитанные с помощью эмпирических потенциалов Бреннера 1990 [1] и 2002 [2], REBO [3], Терсоффа [4], а также специально разработанного для моделирования графена потенциала PPBE-G [5], и обсуждаем применимость этих потенциалов для изучения эффектов и явлений в системах на основе графена. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона определяются на основе вычисления потенциальной энергии в зависимости от продольных и поперечных деформаций образца графена.

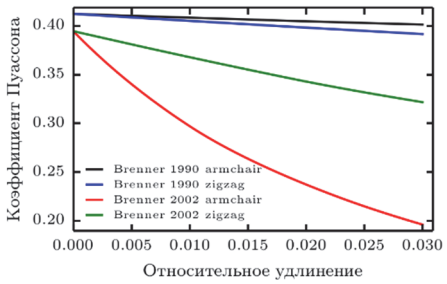


Рис.1. Зависимость коэффициента Пуассона структурно-оптимизированного графена от продольного удлинения в неэквивалентных направлениях armchair и zigzag для потенциалов Бреннера

Вычисления показали, что

1. Учет релаксации структуры оказывает существенное влияние на результат расчета упругих констант графена.
2. Наилучшее совпадение с экспериментальными данными для модуля Юнга (ошибка в пределах 30 %) и коэффициента Пуассона (ошибка в пределах 80 %) получено для потенциала Бреннера 2002 [2].
3. Коэффициент Пуассона снижается с увеличением продольного удлинения (рис. 1).

Таким образом, для более точного моделирования механических явлений в системах на основе графена требуется дополнительный подбор параметров известных на данный момент эмпирических потенциалов.

[1] D.W. Brenner, Phys. Rev. B (1990) 42, 9458.
[2] D.W. Brenner et al., O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys. Condens. Matter. (2002) 14, 783.
[3] S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys. Condens. Matter. (2002) 14, 783.
[4] J. Tersoff, Phys. Rev. B. (1988) 61, 2879.
[5] D. Wei, Y. Song, F. Wang, J. Chem. Phys. (2011) 134, 184704.

СОЗДАНИЕ МАГНЕТРОНОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ АКУСТОПЛАЗМЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ОЧИСТКИ ПОВЕРХНОСТЕЙ И НАПЫЛЕНИЯ НА ПОДЛОЖКИ

Мкртчян А.Р.[1,2], Абраамян А.С.[1]
[1] *Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения*
2 Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация
e-mail: malpic@sci.am

Работа посвящена созданию на основе акустоплазмы нового поколения диодов и магнетронов (в частности колоколообразных) и демонстрации их возможностей.

Показано что акустоплазменное состояние

- улучшает стабильность и увеличивает размер катодного пятна при очистке и напылении;
- повышает однородность напыления;
- уменьшает потребляемую мощность и увеличивает скорость очистки;
- дает возможность тонкой регулировки стехиометрии наночастиц при синтезе и напылении, особенно для колоколообразных магнетронов.

и диапазон модуляции разрядного тока от десятков Гц до десятков кГц.

НАКОПИТЕЛЬ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

Мкртчян А.Р.[1,2], Мкртчян А.Г.[1], Багдасарян А.С.[3], Кочарян В.Р.[1,2], Асланян А.А.[1]

[1] Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения

[2] Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация

[3] Институт радиотехники и электроники им. Котельникова РАН, Российская Федерация

e-mail: malpic@sci.am

Впервые в работе [1] экспериментально при дифракции Лауэ геометрии получена полная переброска пучков тепловых нейтронов из первичного направления в направлении отражения от отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца при наличии температурного градиента. В работе [2] теоретически рассмотрена дифракции нейтронного пучка в монокристаллах под воздействием акустических колебаний и температурного градиента в Лауэ геометрии и получено хорошее согласие между ними.

В настоящей работе рассмотрена возможность накопления тепловых нейтронов при аналогии рентгеновского излучения на основе полной переброски и дифракционной фокусировки пучков тепловых нейтронов.

Детально анализирован вопрос параметров накапливающих пучков тепловых нейтронов: относительная максимальная интенсивность, вопрос фокусировки, угловое и энергетическое распределение получающих пучков. В частности, для энергии нейтронов 0.01 эВ оценки показывают, что с монокристаллом толщиной 5мм от белого пучка можно накапливать нейтроны с угловой расходимостью $\Delta\theta \approx 2'$ и энергетической шириной $\Delta E / E \approx 10^{-3}$, а интенсивность увеличивать на 2÷3 порядка.

[1] А.Р. Мкртчян, Л.А. Кочарян, М.А. Навасардян и др. Изв. АН Армянской ССР, Физика, т.21, вып. 5, сс. 287-289, 1986.

[2] А.Р. Мкртчян, Р.Г. Габриелян,О.А. Унанян, А.Г. Бегларян. Изв. АН Армянской ССР, Физика, т.21, вып. 6, сс. 313-316, 1

ПЕРЕВОД ЭЛЕКТРОННОГО СИНХРОТРОНА ЕРФИ В РАСТЯЖИТЕЛЬНОЙ РЕЖИМ С НИЗКОЙ ЭНЕРГИЕЙ ПУЧКА

Мкртчян А.Р.[1,2], Мкртчян А.Г.[1], Никогосян В.Ц.[1], Кочарян В.Р.[1], Багдасарян Э.Г.[1], Сирунян А.М.[3], Бабаян А.З.[3], Матосян А.А.[3], Галумян А.В.[3]

[1] Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА, Республика Армения

[2] Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, Российская Федерация

[3] Национальная Научная Лаборатория им. А.И. Алиханяна (Ереванский Физический Институт) Республика Армения

e-mail: valery@mail.yerphi.am

Целью настоящей работы осуществить растяжки с низкой энергией электронного пучка до 75MeV. Режим работы растяжки при инжекции энергии до 75 МэВ (50 Гц) представляет интерес в связи с ожидаемой достаточно хорошей светимостью (средний ток 1 мкА) и низкими шумами в среде: отсутствие радиочастотных помех, переменного (50 Гц) магнитного поля индуктивности и синхротронного излучения. Таким образом, режим работы растяжки будет благоприятным для проведения экспериментов на совпадение во внутренних электронных и фотонных пучках. Намереваясь обновить инжектор и синхротронное кольцо до 75 МэВ, понятно, что при этом увеличивается количество мониторов положения пучка, что позволяет осуществить точный диагноз пучка и создать обратную связь в автоматическом режиме и программное управление магнитной системой растяжителя и очевидно, что растяжка приводит к увеличению времени чистого эксперимента.

ИССЛЕДОВАНИЯ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ФУЛЛЕРЕНОВ C_{60} И C_{70} В СМЕСИ ПОЛЯРНЫЙ/НЕПОЛЯРНЫЙ РАСТВОРИТЕЛЬ

Нагорная Т.В.[1,2], Булавин Л.А.[2], Худоба Д.[1,3], Кизима О.А.[1,2], Нагорный А.В.[1,2]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Россия
[2]КНУ имени Тараса Шевченка, Украина
[3]Университет им. Адама Мицкевича, Польша
e-mail: tanya@nf.jinr.ru

Молекулярные растворы на основе фуллеренов C_{60} и C_{70} принадлежат к числу наиболее интенсивно исследуемых веществ. Интерес к ним обусловлен, в первую очередь, оптическими свойствами и перспективой применения в области медицины [1,2]. Фуллерены C_{60} и C_{70} проявляют хорошую растворимость в азотсодержащих растворителях, таких как Н-метил-2-пирролидон (НМП), и также проявляют высокую чувствительность оптических свойств к изменению среды, например, при добавлени смешиваемых растворителей.

НМП – является хорошим растворителем как для молекул C_{60} и C_{70}, так и для воды, что дает возможность переноса фуллеренов в водную среду, и, следовательно, в биологические системы [3,4].

Резкое изменения УФ-Вид спектра систем C_{60}/NMP и C_{70}/NMP при изменении состава, путем добавления воды, хорошо известен как сольватохромный эффект. Это явление может быть связано с появлением донор-акцепторных связей между молекулами растворителя и фуллерена. С другой стороны, временной характер спектров указывает на агрегацию мономеров или их реорганизацию. Таким образом два конкурирующих явления определяют наличие сольватохромизма в системах C_{60}/NMP и C_{70}/NMP.

Представленные в работе УФ-Вид спектры систем C_{60}/NMP и C_{70}/NMP при различном содержании толуола проявляют сольватохромизм. Для оценки изменений в структуре кластеров вышеуказанных систем приведены также результаты измерений методом малоуглового рентгеновского рассеяния. Однако для полного понимая роли кластерообразования в наблюдении сольватохромного эффекта необходимы дальнейшие исследования.

[1] Shpilevkii M. E., Shpilevskii E. M. et al. // *J. Eng. Phys. Thermophys*., 2001, № 74, p 1499-1508.

[2] Thakra S., Mehta R. M. //*Ind. J. Pharm. Sci*., 2006, № 68, p 13-19.

[3] Fortner J. D., Lyon D.Y. et al. // *Environ Sci Technol,* 2005, № 39, p 4307–4316.

[4] Oberdorster E. // *Environ. Health Perspect*., 2004, №112, p 1058-1062.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В НАНОКРИСТАЛЛАХ ФТОРИДОВ БАРИЯ И ЛАНТАНА

Новикова В.В., Иванов Ю.В., Лепешов Г.Г., Авилов А.С.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail:alicestr@yandex.ru

Интерес к изучению кристаллов нестехиометрических фторидов связан с возможностью получения кристаллов с определёнными физическими свойствами. Особый интерес вызывает сверхвысокая фтор-ионная проводимость. Для выяснения ее природы методом прецизионной электронографии были исследованы распределения электростатического потенциала и электронной плотности крайних членов системы BaF_2 - LaF_3. Получены и проанализированы электронограммы поликристаллических образцов BaF_2 и LaF_3 со статистической точностью не хуже 1%. С помощью программы ASTRA [1] уточнены параметры электронной структурной модели Хансена-Коппенса [2]. Из уточненных значений заселенности внешних электронных оболочек (Pv) и сферического сжатия ионов (κ) следует, что оба кристалла имеют преимущественно ионный характер химической связи (см. таблицу). Низкие значения R-факторов между модельными и экспериментальными массивами интенсивностей свидетельствуют в пользу выбранных структурных моделей. Аналитическим методом по программам [3], использующим уточненные параметры мультипольной модели, построены распределения электроста-тического потенциала и электронной плотности (ЭП) и лапласиана ЭП и проведён их топологический анализ. Для нанокристаллов BaF_2 и LaF_3 рассчитаны значения среднего внутреннего потенциала (51,9 В для BaF_2 и 32,7 В для LaF_3) и значения диамагнитной восприимчивости.

Таблица.

	Атом	κ	Pv валентной оболочки	Тепловой фактор A^2	R-фактор
BaF_2	Ba	1*	0.6221	0.58	3.5%
	F	0.93	7.689	0.94	
LaF_3	La	1*	0.79	0.574	2%
	F(1)	0.99	7.17	1.949	
	F(2)	0.98	7.23	1.082	
	F(3)	0.91	8.00	1.322	

Уточненные параметры мультипольной модели Хансена-Коппенса.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-03-00178.

[1] Dudka A.P. // Crystallography Reports, 2002, v.47, p.152.

[2] Hansen N.K., Coppens P. // Acta Crystallographica, 1978, A34, p.909.

[3] Ivanov Yu., Abramov Yu., Tsirelson V. // National Conference on Application of the X-ray, Neutrons and Electrons for Study of Materials, 1997, Abstracts, Dubna: JINR, p.599.

JINR, p.599.JINR, p.599.

СТРУКТУРА И МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ПОЛУМАГНИТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_{1-x}(Mn,Fe)_xSe$

Нуриев И.Р.[1], Назаров А.М.[1], Мехрабова М.А.[2], Садыгов Р.М.[1], Фараджов Н.В.[1], Фарзалиев С.С.[1]

[1] Институт физики им. академика Г.М.Абдуллаева НАНА Азербайджана

[2] Институт Радиационных Проблем НАН Азербайджана

e-mail: afinnazarov@yahoo.com

В настоящей работе представлены результаты исследования структуры и морфологии поверхности эпитаксиальных пленок $Cd_{1-x}(Mn,Fe)_xSe$. Указанные твердые растворы образуются частичным замещением атомов кадмия (Cd) на атомы переходных элементов, соответственно марганца и железа. В этих материалах в магнитном поле изменяется энергетический спектр носителей заряда, благодаря чему появляется возможность управления их свойствами с помощью магнитного поля и температуры.

Эпитаксиальные пленки этих твердых растворов еще не изучены. Согласно литературным данным $Cd_{1-x}Fe_xSe$, в отличие от своих аналогов $Cd_{1-x}Mn_xTe$ и $Cd_{1-x}Fe_xTe$ с решеткой типа сфалерита, кристаллизуются в структуре вюрцита. Эпитаксиальные пленки $Cd_{1-x}(Mn,Fe)_xSe$ выращивались методом конденсации молекулярных пучков в вакууме 10^{-4} Па, на свежесколотых гранях монокристаллов слюды и стекла. В качестве источника использовались заранее синтезированные твердые растворы $Cd_{1-x}Mn_xSe$ (x=0.03).

Химический состав твердых растворов, использованных в качестве источника и структурное совершенство полученных пленок контролировались электронографическим и рентгенодифрактометрическим методами. Параметр решетки и ориентация пленок определялись по кривым качания рентгеновской дифракции по электронограммам отражения. Определены оптимальные условия получения ($\upsilon_к$=8÷9 Å/сек; $T_п$=673 K) структурно совершенных ($W_{½}$=100″-140″) эпитаксиальных пленок, растущих в плоскости (111). Установлено, что при комнатной температуре на подложках слюды растут пленки с поликристаллической, а на стеклянных с аморфной структурой.

Морфологии поверхности исследовалась методом электронной микроскопии. На электронных микрофотографиях исследованных пленок наблюдаются черные скопления, количество которых растет с уменьшением скорости конденсации и увеличением температуры подложки. В соответствие с литературными данными приводимых для других халькогенидов, эти скопления возможно также являются оксидами, образовавшимися во время роста, вследствие захвата кислорода лишними атомами металла (Cd), которые появляются в результате частичного разложения исследуемого материала в процессе напыления. Использованием дополнительного компенсирующего источника паров Se в процессе роста, удалось получить пленки с чистой, гладкой поверхностью.

РЕНТГЕНОВСКИЙ ЕСТЕСТВЕННЫЙ КРУГОВОЙ ДИХРОИЗМ В КРИСТАЛЛЕ ЛАНТАНГАЛЛИЕВОГО СИЛИКАТА ВБЛИЗИ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАЛЛИЯ И ЛАНТАНА

Орешко А.П.[1], Милль Б.В.[1], Овчинникова Е.Н.[1], Рогалев А.[2], Вильхельм Ф.[2], Дмитриенко В.Е.[3]

[1] МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, Россия

[2] European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

[3] ИК имени А.В.Шубникова РАН, Ленинский пр-т, 59, Москва, Россия

e-mail oreshko@mail.ru

Кристаллы лантангаллиевого силиката $La_3Ga_5SiO_{14}$ (лангасит) широко используются в современных технических устройствах благодаря отличным пьезоэлектрическим и нелинейным оптическим свойства. Если один из катионов замещен магнитным ионом, эти кристаллы могут обладать удивительной магнитной структурой, а также и свойствами мультиферроика.

Таким образом, исследование взаимосвязи электронных свойств с кристаллографическими положениями, занимаемыми атомами в лангасите представляет значительный интерес, для ответа на который мы использовали метод рентгеновского естественного кругового дихроизма (XNCD).

Эксперимент по наблюдению сигнала XNCD в лангасите был выполнен на станции ID12 ESRF. В эксперименте измерялись коэффициенты поглощения право- и левополяризованного рентгеновского излучения вблизи K-края поглощения Ga и $L_{2,3}$-краев La.

Эксперимент показал наличие сигнала XNCD, при энергиях выше краев поглощения. Сигнал XNCD на K-крае Ga (из-за p-d гибридизации) оказался в 5 раз сильнее, чем на L-краях La (из-за d-f или p-d гибридизации). На всех краях было обнаружено, что сигналы XNCD при волновом векторе падающего излучения ориентированном вдоль оси c в два раза больше и противоположны по знаку, чем при ориентации волнового вектора перпендикулярно оси c.

Такое соотношение соответствует теоретическим представлениям, согласно которым азимутальная зависимость сигнала XNCD в одноосном кристалле пропорциональна $3\cos2\theta - 1$.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (16-02-00887, 13-02-00760) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАЛОУГЛОВЫХ НЕЙТРОННЫХ ДИФРАКТОМЕТРОВ SANS-2 И SANS-3 НА РЕАКТОРЕ ПИК

Павлов К.А., Коник П.И., Григорьев С.В., Москвин Е.В.
[1] Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ
[2] Санкт-Петербургский государственный университет
e-mail: orbita.pk@lns.pnpi.spb.ru

Две установки малоуглового рассеяния нейтронов SANS-2 и SANS-3 переданы в ПИЯФ НИЦ «Курчатовский институт» из исследовательского центра Гельмгольца в Гестахте, Германия (HZG). Установки необходимо оптимизировать для работы на реакторе ПИК и подготовить к запуску в 2018 году. Установка SANS-2 адаптирована как малоугловой инструмент с поляризованными нейтронами для исследований в области магнетизма и материаловедения. Благодаря существенной пролётной базе (18 м коллимационная труба и 22 м детекторная труба) установка покрывает широкий спектр переданных импульсов от 3 нм$^{-1}$ до 0.001 нм$^{-1}$. Установка SANS-3 имеет более скромные размеры (7 м коллимационной трубы и 9 м детекторной трубы) и будет реконструирована в высокоинтенсивную установку малоуглового рассеяния неполяризованных нейтронов со средним диапазоном переданных импульсов. Эта установка будет востребована для исследований в биологии, и химии. С помощью программного пакета McStas, основанного на моделировании нейтронных траекторий методом Монте-Карло, и расчётных потоков источника холодных нейтронов канала ГЭК-3 реактора ПИК, были созданы модели обеих установок малоуглового рассеяния и проведены расчёты параметров нейтронных пучков. Для каждого из инструментов был оптимизирован индивидуальный нейтроновод, что повысит поток нейтронов на образце по сравнению с использованием унифицированной нейтроноводной системы. В моделях были учтены механизмы потерь интенсивности в нейтроноводах, такие как макроволнистость отражающей поверхности, неидеальность отражательной способности покрытия и угловые разбалансированность оптических секций. Для установки SANS-2 был предложен новый поляризатор, работающий в геометрии на пропускание, параметры которого были оптимизированы. Опыт, приобретенный во время работы над этими установками, будет востребован на реакторе ПИК при создании десятков новых востребованных и конкурентоспособных нейтронных инструментов для исследования структуры и динамики материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (ФЦП, проект №RFMEFI61614X0004).

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОДОЗНОГО НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СУБСТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ОБОЛОЧЕЧНЫХ ТРУБ ИЗ ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Перлович Ю.А., Исаенкова М.Г., Фесенко В.А., Крымская О.А., Кобылянский Г.П., Гончаренко Ю.Д.
Национальный Исследовательский Ядерный Университет (МИФИ)
e-mail: yuperl@mail.ru

Деформированные металлические материалы с развитой кристаллографической текстурой характеризуются резкой структурной неоднородностью, выражающейся в том, что зерна, отвечающие по ориентации текстурным минимумам, предельно искажены и диспергированы, в то время как зерна, отвечающие по ориентации текстурным максимумам, относительно совершенны [1]. Этот общий принцип обусловлен закономерностями пластической деформации, переориентации зерен и их сопутствующего упрочнения. Термообработка деформированных изделий не устраняет неоднородность их упрочнения, а лишь ее ослабляет. Те же особенности характерны и для оболочечных труб из циркониевых сплавов. Трубы из сплава Zr-1%Nb находились 6 лет в активной зоне атомного реактора, а после необходимого «вылеживания» были подвергнуты рентгеновскому исследованию в «горячей» лаборатории для выявления структурных изменений, произошедших в них под воздействием нейтронного облучения. Использованная рентгеновская методика построения обобщенных полюсных фигур позволяла оценивать структурные изменения в зернах с любыми заданными ориентациями. Показано, что под влиянием нейтронного облучения в зернах текстурных минимумов структура совершенствуется, а в зернах текстурных максимумов – дополнительно искажается. Таким образом, неоднородная структура текстурованного металла при облучении стабилизируется, стремясь к некоторому промежуточному уровню, зависящему от энергии потока нейтронов.

[1] Perlovich Yu., Bunge h.J, Isaenkova M. // Textures and Microstructures, 1997, vol. 29, N 3-4, pp. 241-266.

МЕТОДЫ ЭЛЕКТРОННО-ИОННОЙ МИКРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИИ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОРОДЫ БАЖЕНОВСКОЙ СВИТЫ

Пичкур Е.Б.[1,2], Михуткин А.А.[1], Васильев А.Л.[1], Спасенных М.Ю.[3], Пресняков М.Ю.[1]

[1] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва, Россия.

[2] Московский физико-технический институт (государственный университет), г. Долгопрудный, Московская обл., Россия 3. Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия

Применение современных методов растровой электронной микроскопии (РЭМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) к исследованию сланцев дает возможность исследовать «органопористость», распределение керогена в них, а также оценить параметры пористости. Полное исследования пустотного пространства в сланцевых породах требует наряду с другими методами применения просвечивающей/растровой электронной микроскопии и микроанализа. Причем аккуратное определение наличия и размеров пор в органических включениях сланцевых пород в диапазоне менее 100 нм возможно только методами просвечивающей/растровой электронной микроскопии (П/РЭМ) и микроанализа. Определение состава образца возможно с помощью микроанализа или, при использовании режима ПРЭМ и детектора рассеяния электронов на большие углы по характерному контрасту. В этом случае области, обогащенные легкими атомами, а при исследованиях сланцев – это кероген или другие органические включения, выглядят темными по сравнению с минеральной матрицей. Для полноты картины исследования необходимо объединение методов П/РЭМ с другими методами – РЭМ, рентгенофазового анализа, трехмерной реконструкции.

В настоящей работе нефтеносные породы Баженовской свиты были исследованы в двухлучевом ФИП-РЭМ FEI Helios NanoLab 600i, а также FEI Scios, проведено элементное картирование, полукачественная оценка химического состава с помощью ЭДРМА, были обнаружены пористые области керогена и проведена их последующая трехмерная реконструкция. Из этих областей были подготовлены ламеллы, исследованные в дальнейшем в ПЭМ/ПРЭМ FEI Titan 80-300 и картированные в ПЭМ FEI Tecnai Osiris. Для постобработки изображений использовалось ПО Amira (FEI) и ImageJ. В результате работы была обнаружена микро(нано-) пористость керогена и, в некоторых случаях, окружающей его минеральной матрицы, были созданы модели пустотных пространств породы, получены данные о распределении керогена, сделаны численные оценки содержания органического вещества, пористости и связности пор как по двухмерным изображениям шлифов, так и по трехмерной реконструкции.

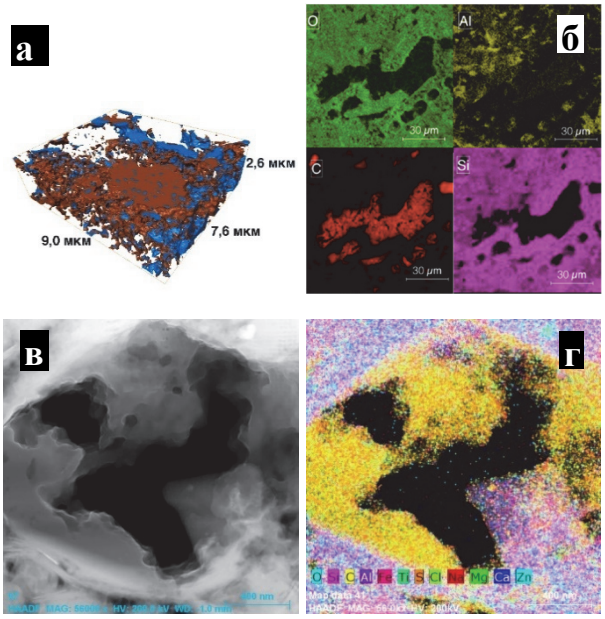


Рис.1. а.) Синим – поровое пространство в сланце, коричневым – кероген. б.) Элементное картирование в РЭМ. в.) ПЭМ изображение поры в керогене. г.) ПЭМ ЭДРМА картирование позволяет сделать вывод о присутствии органического вещества.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ CVD ПЛЕНОК АЛМАЗА С ПРИРОДНЫМ И МОДИФИЦИРОВАННЫМ ИЗОТОПИЧЕСКИМ СОСТАВОМ

Прохоров И.А.[1], Волошин А.Э.[1], Ральченко В.Г.[2], Большаков А.П.[2], Романов Д.А.[3], Хомич А.А.[4], Созонтов Е.А.[5]

[1] Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

[3] Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана. Калужский филиал

[4] Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

[5] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: igor.prokhorov@mail.ru

Монокристаллы синтетического алмаза благодаря уникальным свойствам этого материала находят всё более широкое применение в различных областях науки и техники. При этом особенно многообещающими являются кристаллы, получаемые методом осаждения из газовой фазы (chemical vapor deposition – CVD), так как этот ростовой процесс позволяет получать не только наиболее чистые кристаллы, но и прецизионно управлять содержанием примеси, что особенно важно в электронных и некоторых оптических применениях. Целенаправленное изменение изотопного состава позволяет улучшать уникальные свойства этого материала.

Методами двухкристальной рентгеновской дифрактометрии и топографии проведены сравнительные исследования гомоэпитаксиальных пленок алмаза с природным и модифицированным изотопическим составом, выращенных осаждением из газовой фазы на подложках из Ib алмаза. В изотопически модифицированных пленках ^{13}C (99,96%) зарегистрировано уменьшение периода

кристаллической решетки $(\Delta a/a)_{relax} \sim 1.2 \cdot 10^{-4}$. Рассчитаны критические толщины псевдоморфных пленок алмаза. Методами рентгеновской топографии выявлено значительное повышение плотности дислокаций в толстых пленках алмаза, обусловленное релаксацией упругих напряжений. Сравнительные исследования гомоэпитаксиальных структур алмаза и германия (кристаллографического аналога алмаза) выявили ряд особенностей пластической деформации в этих материалах, обусловленных спецификой распределения упругих напряжений в эпитаксиальных структурах.

РАЗВИТИЕ РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ УПРАВЛЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНО-ВРЕМЕННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА

Проценко А.И[1,2]., Благов А.Е.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Просеков П.А.[1,2], Элиович Я.А.[1,2], Таргонский А.В.[1,2], Краснов М.П.[1]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: 8xenderx8@gmail.com

На современном этапе развития рентгенодифракционные исследования все чаще переходят от изучения кристаллических структур в статичных объектах к исследованию динамических процессов. Одним из подходов к существенному увеличению быстродействия при проведении рентгенодифракционных экспериментов был недавно предложен коллективом авторов [1]. Также был проведен модельный эксперимент, демонстрирующий возможность управления спектральными характеристиками рентгеновского пучка с высоким временным разрешением при помощи составного продольного пьезоэлектрического резонатора [2].

В настоящей работе с использованием методических основ, заложенных в предыдущих работах, была предложена и реализована рентгенооптическая схема, позволяющая осуществлять управление длиной волны рентгеновского пучка. Для чего на станции «МЕДИАНА» ККСНИ НИЦ «Курчатовский институт» была смонтирована установка, схематически приведенная на рис.1(а). В результате дифракции на резонаторе, длина волны рентгеновского пучка меняется в зависимости от фазы колебания резонатора. За кристаллом-анализатором максимум интенсивности наблюдается при соответствии длины волны дифрагированного излучения и углового положения кристалла-анализатора условию Вульфа-Брэгга. Использование многоканальной детектирующей системы позволяет получить зависимость интенсивности от фазы колебания резонатора. Фаза пересчитывается в длину волны дифрагированного на резонаторе излучения. Результат серии измерений при различных положениях кристалла-анализатора приведен на рис.1(б).

Отдельные кривые рис.1(б) записывались в течение 500 мсек., что демонстрирует возможность быстрой перестройки рентгеновского пучка как в пространстве, так и по спектру.

Данная схема позволяет существенно увеличить быстродействие при проведении экспериментов, например, по рентгеновской абсорбционной спектроскопии.

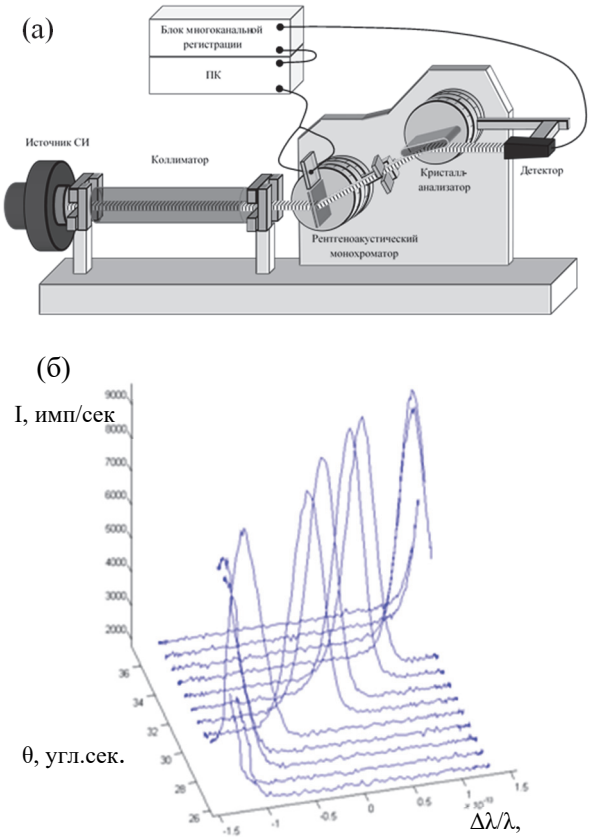


Рис.1 (а) Схема экспериментальной установки. (б) Двумерная (пространственно-спектральная) зависимость интенсивности рентгеновского пучка, записанная блоком многоканальной регистрации при последовательном повороте кристалла-анализатора.

[1] Ковальчук М.В., Таргонский А.В., Благов А.Е. и др. // Кристаллография, 2011, том 56, № 5, с 886-889

[2] А. Е. Благов, Ю. В. Писаревский, М. В. Ковальчук // Кристаллография. - 2016. - Т. 61, № 2. - С. 191-194

НЕПРЕРЫВНО-АТОМИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ СРЕДАМИ

Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д., Шарипов З.А.
Объединенный институт ядерных исследований
E-mail: zarif@jinr.ru

В работе исследуется возможность применения непрерывно-атомистического подхода [1,2] для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с конденсированными средами. Непрерывно-атомистическая модель представляет собой два разных класса задач, а именно непрерывные уравнения теплопроводности с источником модели термического пика [3] и уравнения движения облучаемых пучком материальных точек, метода молекулярной динамики [4]. Численное решение уравнений непрерывно-атомистической модели требует разработки согласованных вычислительных схем, для разных классов задач, учитывающих свойства уравнений модели. В работе для решения уравнений непрерывно-атомистической модели разработан алгоритм и вычислительная схема с возможностью использования в многопроцессорных системах. Получены результаты исследований на примере металлических мишеней при облучении тяжелыми ионами высоких энергий.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-01-06055-а и гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ

[1] D. Ivanov and L. Zhigilei. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Physical Review B 68. 064114 (2003).

[2] Norman G.E., Starikov S.V., Stegailov V.V., Saitov I.M., Zhilyaev P.A. Atomistic modeling of warm dense matter in the two-temperature state // Contrib. Plasma Phys. 2013. V. 53. P. 129-139.

[3] М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров. Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. N.31. № 2(8). С.232-237.

[4] Х.Т. Холмуродов, М.В. Алтайский, И.В. Пузынин и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472-515.

ЗАРЯДОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ САПФИРА, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ЦИНКОМ

Рау Э.И.[1], Татаринцев А.А.[1,2], Привезенцев В.В.[2]
[1] *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *ФТИАН РАН, Москва, Россия*
e-mail: privezentsev@ftian.ru

При исследовании новых диэлектрических объемных материалов или диэлектрических пленок методами электронной микроскопии встает вопрос о взаимодействии электронов с поверхностью диэлектриков. При этом особый интерес представляет вторичная электронная эмиссии (ВЭЭ) из диэлектриков. В последние годы ВЭЭ из сапфира посвящен ряд работ, в частности, исследовалась зарядка сапфира электронным пучком с энергией E_0 от сотен эВ до десятков кэВ [1, 2]. В работе [3] показано влияние на кинетику зарядки монокристалла сапфира, предварительно имплантированного ионами инертного газа Ar^+. В данной работе исследовано влияние имплантации ионов металла Zn^+ на процесс установления равновесного состояния зарядки сапфира.

В работе [3] описаны схема экспериментальной установки и методика проведения эксперимента. Технология создания образцов, их структура и свойства приведены в работе [4]. Образцы сапфира заряжались электронным пучком с энергиями E_0=5 кэВ и E_0=15 кэВ при плотности тока 10^{-5} А/см^2. На рис. 1 показаны зависимости установления потенциала поверхности для случая энергии E_0=15 кэВ и плотности тока 10^{-5} А/см^2.

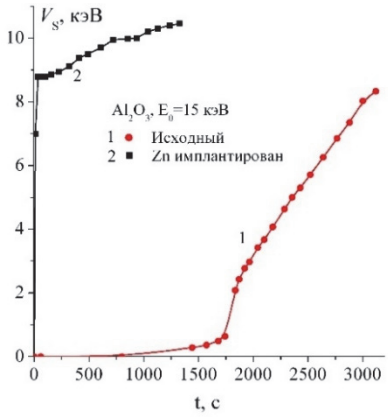


Рис. 1. Зависимость поверхностного потенциала исходного сапфира (кривая 1) и сапфира, имплантированного ионами Zn^+ (кривая 2) от времени облучения пучка электронов при энергии E_0=15 кэВ и плотности тока 10^{-5} А/см^2.

Из полученных данных можно сделать следующий общий вывод: процесс зарядки сапфира, имплантированного ионами Zn^+, происходит быстрее, чем для исходного образца. Это может быть объяснено возникновением значительного числа дефектов-ловушек электронов в сапфире после имплантации ионами Zn^+.

[1] Belhaj M. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2014. v. 320, pp. 46-60.

[2] Cazaux J. // Microsc. Microanal., 2004. v.10, pp. 670-675.

[3] Rau E.I. et al. // Vacuum. 2016. v. 129, pp. 142–147.

[4] Privezentsev V.V. et al. // Sol.-St. Phenom. 2016. v. 242, pp. 396-401.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УЗЛА ОБРАТНОЙ РЕШЁТКИ В УСЛОВИЯХ СЕРИЙНОЙ СЪЁМКИ МОНОКРИСТАЛЛОВ БЕЛКОВ

Рубинский С.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника РАН»
e-mail: sergeirubinsky@rambler.ru

С появлением источников синхротронного излучения (СИ) 3 поколения и ЛСЭ стало возможным получение дифракционной картины от биологических монокристаллов при облучении образца импульсами длительностью несколько десятков фс на предельных значениях поглощенной дозы, при превышении которой наступают необратимые изменения в структуре биомолекул. Обычно эта величина составляет от 1МГр до нескольких ГГр [1]. Сбор данных проводится путем регистрации дифракционных картин от серии (в несколько тысяч) монокристаллических образцов микронных размеров, доставляемых тем или иным способом в фокус первичного пучка. Методика обработки полученных таким способом изображений существенно отличается от классического метода вращения, т.к. исследуемые кристаллы изначально повернуты на случайные углы относительно лабораторной системы координат, и каждая дифракционная картина содержит для любого отражения лишь некоторую трудно контролируемую часть интегральной интенсивности. В работе [2] нами была построена трехмерная модель узла обратной решетки применимая для сбора данных методом вращения в общем случае наклонной геометрии. Здесь мы предпринимаем попытку применить указанную модель к условиям серийной съемки. Обсуждаются особенности применения модели как на этапах уточнения параметров съемки, так и в процессе определения интегральной интенсивности как путем простого суммирования, так и с помощью подгонки профилей отражений.

[1] Nicholas K. Sauter. XFEL diffraction:developing processing methods to optimize data quality. J. Synchrotron Rad.(2015). 22,239-248.

[2] Рубинский С.В.,Хейкер Д.М. Интервал сканирования и размеры дифракционных пятен в общем случае наклонной геометрии с учетом мозаичности и расходимости первичного пучка. Кристаллография (1993) т.38, вып.3

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ SESANS ЭКСПЕРИМЕНТА С МАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ, ЛИНЕЙНО РАСТУЩИМИ ВО ВРЕМЕНИ

Садилов В.В.[1,2], Боднарчук В.И.[2], Маношин С.А.[2], Ерхан Р.В.[2], Дорошкевич А.С.[2], Авдеев М.В.[2,3], Иоффе А.И.[4]
[1] Физический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[2] Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна МО, Россия
[3] Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина ЛО, Россия
[4] Юлихский нейтронный центр, Исследовательский центр Юлих, Юлих, Германия
e-mail: vv.sadilov@physics.msu.ru

Существует несколько вариантов развития метода нейтронного спинового эха (НСЭ) для импульсных источников нейтронов. В данной работе рассматривается метод спинового эха для регистрации малоуглового рассеяния нейтронов, в основе которого лежит использование линейно растущих магнитных полей в спиновых ротаторах, последовательно кодирующих и декодирующих скорость нейтронов. НСЭ установка на данном принципе реализуется в настоящее время на импульсном реакторе ИБР-2 в Дубне. Импульсный характер работы данного метода хорошо сочетается с импульсным характером источника нейтронов. В работе рассматриваются особенности работы данного метода путем Монте-Карло моделирования работы НСЭ установки в программном пакете VITESS с использованием реальных параметров источника и геометрии создаваемой установки.

[1] Ioffe A. // Nucl. Instr. and Meth. A, 2008, V. 586, pp 31–35

[2] Ioffe A. // Nucl. Instr. and Meth. A, 2011, V. 634, pp 55–58

[3] Mezei, F. // Zeitschrift für Physik, 1972, V. 255, Issue 2, pp 146-160

[4] Pynn, R. // Journal of Physics E: Scientific Instruments, 1978, V. 11, pp 1133-1140

[5] Keller T., Gaehler R., Kuntze H., Golub R. // Neutron News, 1995, V. 6(3) , pp 16-17

[6] Rekveldt M.Th. // Nuclear Ins. and Meth. in Phys. Res. B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1996, V. 114, pp 366-370

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД И НАНОДИАГНОСТИКИ НА БАЗЕ ИМПУЛЬСНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ ИН06 ИЯИ РАН: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ

Садыков Р.А.[1,2], Литвин В.С.[1,5], Клементьев Е.С.[1,4], Трунов Д.Н.[1], Аксенов С.Н.[1], Кузнецов С.П.[3], Мешков И.В.[3], Лапушкин Ю.А.[3], Алексеев. А.А.[1], Марин В.Н.[1], Поташев С.И.[1], Сидоркин С.Ф.[1], Соболевский Н.М.[1], Фещенко А.В.[1], Серов В.Л.[1], Алексеев П.А.4, Булкин А.П.6, Ульянов В.А.[6], Коптелов Э.А.[1,5], Кравчук Л.В.[1]

[1] Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк

[2] Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк

[3] Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Москва,

[4] НИЦ «Курчатовский институт», Москва,

[5] МФТИ, Моск., обл.

[6] Петербургский институт ядерной физики, Гатчина.

rsadykov@inr.ru

В ИЯИ РАН создан импульсный источник нейтронов ИН06 на базе сильноточного линейного ускорителя протонов для развития нейтронных исследований конденсированных сред и активно развивающейся области исследований наносистем и функциональных материалов. Создан комплекс нейтронографических установок первой очереди. Получены первые спектры прямых пучков установок и нейтронограммы тестовых образцов.

Первые нейтронографические установки, каждая из которых имеет свою схему коллимации и сбора нейтронов: коллиматоры, нейтроноводы и нейтронные концентраторы прямого пучка. Целью работы было проведение тестовых измерений нейтронограмм и определение вида спектра в зависимости от типа нейтроно-оптической схемы коллимации и сбора нейтронов каждой нейтронографической установки. На рис.1 показано расположение нейтронографические установки первой очереди, созданные совместно с НИЦ-КИ, ФИ РАН, ПИЯФ, ИФВД на импульсном источнике тепловых нейтронов ИН06.

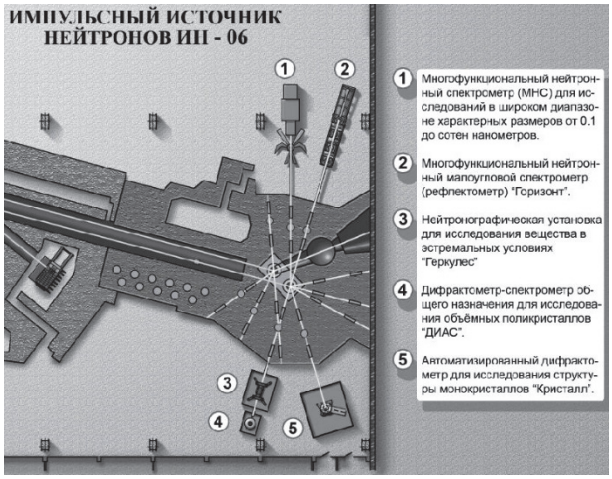


Рис.1.

СОСТАВНЫЕ РЕФРАКЦИОННЫЕ ЛИНЗЫ ИЗ БЕРИЛЛИЯ - ОПЫТ СОЗДАНИЯ И ТЕСТЫ

Сенин Р.А.[1,2]. Семенов А.А.[3], Пикуз С.А.[4], Забродин А.В.[3], Горлевский В.В.[3], Шевердяев М.С.[3], Лизунов А.В.[3], Брылёв Д.А.[3], Аникин А.С.[3], Клыков С.С.[3], Козлова Е.В.[3], Лесина И.Г.[3], Небера А.Л.[3], Морозов И.А.[3], Бузмаков А.В.[2], Дымшиц Ю.М.[2], Волков В.В.[2], Жигалина О.М.[2,5], Конарев П.В.[2], Хмеленин Д.Н.[2], Серегин А.В.[2,5], Гогин А.А.[1], Борисов М.М.[1], Мухамеджанов Э.Х.[1], Рощин Б.С.[2], Асадчиков В.Е.[2,6]

[1] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт

[2] Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН»

[3] АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара»

[4] Объединенный институт высоких температур РАН

[5] Московский Государственный Технический Университет им. Н.Э. Баумана

[6] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

e-mail: senin_ra@nrcki.ru

В докладе представлен отечественный опыт создания составных преломляющих линз (CRL, [1]) параболического профиля из Be.

Обоснован выбор материала - сортов бериллия [2,3] по результатам исследований с помощью электронной микроскопии и рентгеновских методов, в частности, МУР [4]. Представлены первые результаты по применению изготовленных рефракционных линз. Даны теоретические оценки достижимых параметров [5]. Эксперименты по фокусировке выполнены на станциях Курчатовского источника синхротронного излучения [6,7].

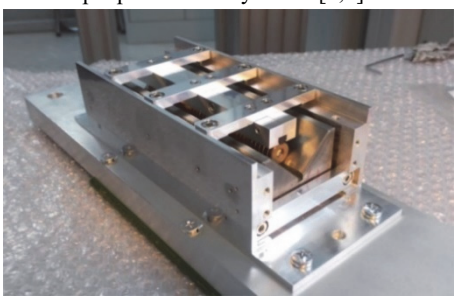


Рис. Изображение изготовленной линзы в корпусе.

[1] Lengeler B., Schroer C., Benner B., et al // Nuclear Instruments & Methods A. 2001. V. 467-468. P. 944-950.

[2] Семенов А.А. // Атомная энергия. 2015. Т.119, № 5. С. 255-259.

[3] Семенов А.А., Забродин А.В., Горлевский В.В. и др. // Научно-практический межотраслевой журнал «Интеграл», 2014 Т. 77. № 4. С. 28-31.

[4] Могилевский Л.Ю., Дембо А.Т., Свергун Д.И и др. // Кристаллография. 1984. Т. 29. № 3. С. 587.

[5] Samoylova, L., Buzmakov, A., Chubar, O et.al. //Journal of Applied Crzstallography 2016. (submitted)

[6] Сенин Р.А., Хлебников А.С., Вязовецкова А.Е., и др. // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 3. сс. 510-516.

[7] Я.В.Зубавичус, Э.Х.Мухамеджанов, Р.А.Сенин. //Природа № 12. 2013. сс 37-44.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕХОДОВ В АНИОН-ДЕФИЦИТНЫХ КОБАЛЬТИТАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Сиколенко В.В.[1,2], Троянчук И.О.[3], Тютюнников С.А.[1], Карпинский Д.В.[3], Ефимов В.В.[1], Ritter C.[4], Schorr S.[5]

[1] Объединённый институт ядерных исследований

[2] НОЦ «Функциональный наноматериалы» Балтийского федерального университета им. И.Канта

[3] Научно-практический центр по материаловедению НАН РБ, Минск

[4] Institute Laue Langevin

[5] Helmholtz Zentrum Berlin

e-mail: vadim.sikolenko@jinr.ru

Анион-дефицитные кобальтиты, допированные ионами бария, со степенью окисления кобальта, близкой к 3+ были исследованы методами нейтронной и рентгеновской дифракции в широком диапазоне температур и давлений.

Был обнаружен плавный переход от ферромагнитной к антиферромагнитной структуре через промежуточную смешанную фазу. Также был обнаружен структурный переход из ромбоэдрической в орторомбическую фазу в образцах с малым содержанием бария.

Возможные механизмы фазовых разделений и магнитный переходов между высокоспиновым и низкоспиновым состояниями ионов кобальта также обсуждаются в данном докладе.

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ПАРАМЕТРАМИ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА И ЗНАЧЕНИЯМИ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ЭНЕРГИЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

Скоробогатова Т.В.[1], Крисько О.В.[2], Силонов В.М.[3]

[1] к.ф.-м.н., доцент, Московский государственный технический университет гражданской авиации, Россия, Москва;

[2] к .ф.-м .н, профессор, Московский университет им. С.Ю. Витте, Россия, Москва.

[3] д. ф.-м. наук, профессор, Московский государственный университет имени М.И. Ломоносова, Россия, Москва.

Искажения идеальной кристаллической решетки при случайном распределении примесных атомов (ближний порядок) является одним из факторов, влияющих на физические свойства металлов [1]. В работе исследуется связь деформационной энергии кристалла и ближнего порядка в расположении атомов разного сорта в твердых растворах.

Для анализа влияния деформационной энергии на ближний порядок были выбраны растворы, параметры ближнего порядка α_1, которых на первой координационной сфере были получены рентгено- и нейтронографическими методами [2]. Из известных в литературе систем были оставлены 24 системы. Отбирались данные по двухкомпонентным твердым растворам с наименьшей концентрацией второй компоненты. Системы, в которых концентрация второй компоненты превышала 30 атомных процентов, исключались.

Проведенные расчеты показали значительную корреляционную зависимость между экспериментальными значениями α_1 (параметрами ближнего порядка [3]) и теоретическими значениями деформационной энергии, рассчитанными в приближении Борна-Бегби [4]. Это говорит о значительном влиянии деформации кристаллической решетки на ближнее упорядочение. Получено эмпирическое уравнение, связывающее параметр порядка двухкомпонентного раствора с деформационной энергией.

[1] Жмурко Г.П., Кацнельсон А.А., Силонов В. М., Соколовская Е.И., Скоробогатова Т.В. Ближний порядок и микротвердость сплавов Pd-Au и Pd-Au-Rh. Изв. ВУЗов Физика, 1987, n.12, с.82-84.

[2] Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах.: М: Наука, 1977г.

[3] Силонов В.М. Ближний порядок и размерный эффект в металлических твердых растворах. РЭНСИТ. 2011, т.3, N 1, стр. 34-46

[4] Begbie G.n., Born M. Thermal scattering of X - rays by crystals. Dynamic foundation. Proc. Roy. Soc. A188. 1947. p.179-188.

МЕТОД ТРАЕКТОРИЙ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ

Смирнова И.А., Суворов Э.В.

Институт физики твердого тела РАН

e-mail: suvorov@issp.ac.ru

Рентгеновская топография – это совокупность рентгеновских дифракционных методов, позволяющих увидеть изображения дефектов, определить их тип, пространственное расположение в объеме кристаллической структуры или на её поверхности, измерить их основные характеристики.

Рентгеновское волновое поле в деформированном кристалле описывается уравнениями Такаги. Для случая произвольного поля смещений получить аналитическое решение системы уравнений Такаги не удается. Поэтому методы описания волнового поля в кристалле развивается в двух направлениях. Первый путь – это численные методы решения системы дифференциальных уравнений Такаги. Второй - приближенное описание дифракции. На этом пути широкое распространение получил метод траекторий. В работе [1] метод траекторий позволил не только качественно, но и количественно описать тонкие эффекты полного отражения в случае Лауэ дифракции в кристалле с изгибной деформацией.

Построение траекторий волн позволяет восстановить фазы и амплитуды волнового поля. Поскольку амплитуды волн меняются медленно, формирование рентгеновского изображения вначале пути волн определяется разностью фаз, т. е. фазовыми соотношениями волн, отвечающих обеим системам лучей – возникает чисто фазовый контраст. По мере углубления в кристалл изменение амплитуд начинает оказывать все большее влияние на интенсивность суммарного поля. Наконец, сильно поглощающееся поле практически исчезает и перестает вносить вклад в рентгеновское изображение. В этом случае контраст не зависит от разности фаз и определяется амплитудой слабо поглощающей волны, а точнее плотностью траекторий на выходной поверхности кристалла. Данная картина формирования рентгеновского изображения существенно

осложняется, если при больших градиентах деформации траектории, принадлежащие одному и тому же типу волн, пересекаются. В этом случае определение амплитуды каждого волнового поля требует учета интерференции всех лучей пришедших в данную точку на выходной поверхности кристалла, так что даже в случае полного исчезновения сильно поглощающегося поля интенсивность изображения продолжает зависеть от фазы, являющейся неоднозначной функцией координат.

В данной работе метод траекторий применен для моделирования рентгеновского волнового поля в поглощающем кристалле Si с краевой дислокацией перпендикулярной поверхности кристалла. Написана программа для использования метода в численных расчетах. Выполненные расчёты для случая сферической волны сравниваются с результатами прямого интегрирования уравнений Такаги и с экспериментом [2]. Полученные дифракционные изображения дислокации в дальнем поле дефекта для случая эффекта Бормана показало хорошее согласие с экспериментом и стандартным численным интегрированием. При этом существенно сокращается время расчета.

[1] Кон В.Г. // Кристаллография, 2007, том 52, №4, с 625-630; 2008, том 53, №2, с 203-209.

[2] Смирнова И.А., Суворов Э.В., Шулаков Е.В. // ФТТ, 2007, том 49, №6, с 1050-1055.

СТРУКТУРА ШАПЕРОНИНА БАКТЕРИОФАГА ОВР

Станишнева-Коновалова Т.Б.[1], Курочкина Л.П.[2], Соколова О.С.[1]

[1] МГУ имени М.В.Ломоносова

[2] Институт биоорганической химии им. академиков М.М Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

e-mail: stanishneva@mail.ru

Шаперонины являются одной из групп молекулярных шаперонов - белков, обеспечивающих правильное сворачивание полипептидной цепи. Они представляют собой комплексы из нескольких субъединиц, обладающие внутренней полостью, в которую попадает белок-субстрат. Общим для всех шаперонинов является наличие открытой и закрытой конформаций, переход между которыми происходит за счёт гидролиза АТФ. Недавно было обнаружено, что геномы бактериофагов также кодируют собственные шаперонины, отличные по своим свойствам от шаперонинов бактерий и эукариот[1,2]. Объектом данного исследования является шаперонин – gp246 – фага ОВР Pseudomonas fluorescens.

Для изучения структуры gp246 использовался метод электронной микроскопии макромолекул. Электронные микрофотографии частиц на углеродной подложке были получены на микроскопе JEOL JEM 2100 с увеличением x40000. Изображения отдельных частиц обрабатывались в программах IMAGIC и EMAN2, в результате чего была построена трёхмерная реконструкция gp246.

Полученная структура представляет собой кольцо из семи субъединиц. Это отличает её от большинства шаперонинов, как правило, состоящих из двух колец. Данные электронной микроскопии подтверждаются результатами аналитического центрифугирования, согласно которым масса шаперонина примерно соответствует массе гептамера2. Следующим шагом работы является получение структур открытой и закрытой конформаций, для чего исследуются образцы шаперонина в комплексе с АТФ и в комплексе с АДФ.

Исследование поддержано грантом РФФИ (16-04-01587).

[1] Kurochkina L.P., Semenyuk P.I., Orlov V.N. et al. // J.Virol., 2012, 86, pp. 10103-10111.

[2] Semenyuk P.I., Orlov V.N., Sokolova O.S., Kurochkina L.P. // Biochem J., 2016, 473, pp. 2383-2393.

ПРОСТОЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ (σ-π) ПОЛЯРИЗАЦИИ НА СИНХРОТРОННЫХ СТАНЦИЯХ С ДВУМЕРНЫМ ДЕТЕКТОРОМ

Сульянов С.Н.[1,2], Молоденский Д.С.[1], Дороватовский П.В.[1]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: sul942@yandex.ru

Современные синхротронные станции с двумерными детекторами и специальное программное обеспечение позволяет измерять рассеиваемую объектом интенсивность с точностью не хуже 1%. Поправки на поляризацию и поглощение крайне важны при обработке двумерных дифракционных картин. Точный учет поляризации особенно критичен при получении данных при больших углах дифракции, необходимых для получения наиболее полного набора данных при определении электронной плотности. Нами предложена и описана [1] простая методика измерения коэффициента линейной поляризации. Картина рассеяния от стеклянной пластинки, установленной перпендикулярно первичному пучку, регистрируется детектором, установленным также перпендикулярно пучку. Изменения интенсивности вдоль азимутального угла ρ при постоянном угле дифракции интерполируется теоретической зависимостью cos2ρ. Представлены результаты измерений, проведенных на синхротронной станции «Белок» с Mar CCD детектором, установленный на пучке из поворотного магнита в Курчатовском центре СИ. Разработана графическая интерактивная программа для проведения всех расчетов [2].

[1] Sulyanov S.N., P. Dorovatovskii and Hans Boysen // J. Appl. Cryst., V. 47, pp. 1449-1451

[2] Молоденский Д.С., Сульянов С.Н. // Кристаллография, 2015, том 60, №3, с 496-498

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЙ РОСТ ПЛЁНОК InGaAs В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ РЕЖИМЕ НА ПОДЛОЖКАХ INP (100) И (411)

Трунькин И.Н.[1], Васильев А.Л.[1,2], Галиев Г.Б.[3], Пушкарев С.С.[3], Климов Е.А.[3], Клочков А.Н.[3]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт кристаллографии РАН, Москва
[3] Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН
e-mail: igor.trunckin@yandex.ru

Плёнки GaAs и InGaAs, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии при пониженной температуре подложки, (low-temperature GaAs/InGaAs, LT-GaAs/InGaAs) могут быть использованы для изготовления фотопроводящих антенн – генераторов и детекторов гигагерцового и терагерцового излучения.

Цель настоящей работы – исследование влияния давления As_4 и кристаллографической ориентации подложек InP на особенности кристаллической структуры плёнок LT-InGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

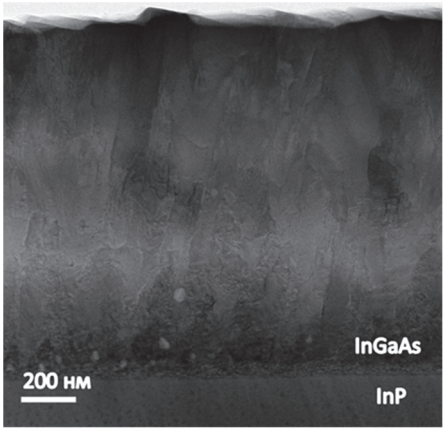


Рис.1. Светлопольное ПРЭМ-изображение образца LT-InGaAs.

Исследования методом просвечивающей/растровой электронной микроскопии и дифракции электронов показали, что кристаллическая структура плёнок LT-InGaAs, выращенных при соотношении давления потоков атомов групп элементов V/III $\gamma = 29$ на подложках (100) и (411) InP, представляет собой текстурированные поликристаллы, но с большой концентрацией двойников и дефектов упаковки в последнем случае. Плёнки, выращенные при $\gamma = 90$ на подложках (100) InP, являются поликристаллическими, исключая ~ 70 нм монокристаллический слой вблизи границы раздела. Пленки на подложках (411) – полностью поликристаллические.

Повышенная дефектность пленок на подложках (411) InP увеличивает рассеяние электронов и уменьшает их подвижность. Критическое значение для роста монокристаллического LT-InGaAs имеет соотношение потоков атомов элементов V и III групп: при повышении значения γ от 29 до 90 плёнки LT-InGaAs микроструктура пленок меняется от текстурированной до полностью разориентированной и это негативно сказывается на свойствах материала для изготовления терагерцовых антенн.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОГРАНИЦ ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Трунькин И.Н.[1], Пресняков М.Ю.[1], Васильев А.Л.[1,2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт кристаллографии РАН, Москва
e-mail: igor.trunckin@yandex.ru

В настоящее время на гетероструктурах типа InAlAs/InGaAs/InAlAs сформированы самые быстродействующие транзисторы. Такие значения частотных характеристик достигаются благодаря высоким значениям подвижности электронов μ_e и дрейфовой скорости насыщения. Подвижность электронов сильно зависит от структурного качества гетеросистем, от шероховатостей границ. Необходимо определить влияние различных факторов, особенностей подложки, параметров роста на структуру гетеросистем и определить их влияние на электрофизические характеристики.

Для исследования этих систем применялся метод просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) с регистрацией электронов, рассеянных на большие углы. Этот метод дает возможность оценить размеры слоев с атомной точностью, особенности гетерограниц, в том числе области перемешивания на интерфейсах и латеральные размеры шероховатостей. Существенный Z-контраст (зависящий от номера элемента), присутствующий на изображениях позволяет также оценивать состав слоев. Все это важно для определения механизмов рассеяния электронов, существенно влияющих на подвижность.

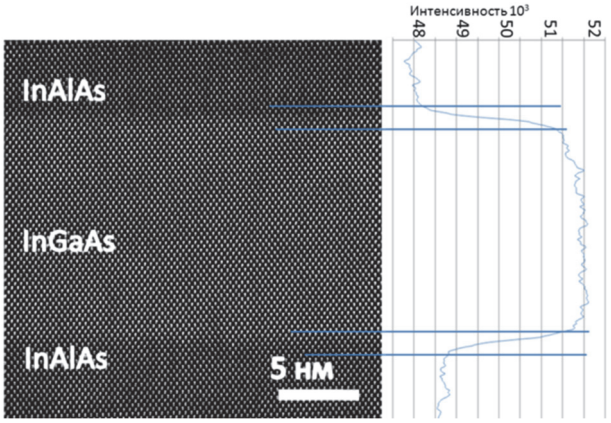


Рис.1. Темнопольное ПРЭМ-изображения, полученное регистрацией электронов, рассеянных на большие углы и линейный профиль интенсивности, усредненный по ширине.

В рамках работы было исследовано влияние: а) разориентации подложки на структурные качества гетероструктуры, б) соотношения давлений потоков V/III групп элементов в камере во время роста вставок InAs, с) температуры формирования и г) размеров вставки InAs, д) различных комбинации двух вставок InAs и е) барьерных слоев GaAs на структурное совершенство и электрофизические свойства. Выявлены особенности микроструктуры, влияющие на подвижность электронов.

ЗАГАДКА ТОЛАЗАМИДА: МОЖНО ЛИ ПОВЛИЯТЬ ДАВЛЕНИЕМ НА ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОЛИМОРФНЫЕ МОДИФИКАЦИИ? ДИФРАКЦИОННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Федоров А.Ю.[1,2], Рычков Д.А.[1,2], Лосев Е.А.[1,2], Захаров Б.А.[1,2], Болдырева Е.В.[2]

[1] ФГБОУ ВПО «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»

[2] ФГБУН «Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН»

e-mail: alexfed97@yandex.ru

Полиморфизм органических соединений представляет большой интерес для науки и фармацевтической индустрии. Изоэнергетический полиморфизм – особый вид полиморфизма, при котором полиморфный переход из одной модификации в другую не имеет теплового эффекта. Ранее было показано, что полиморфные модификации толазамида – антидиабетического лекарственного препарата – являются изоэнергетическими, несмотря на значительно различающиеся молекулярные упаковки [1]. Кроме того, эти модификации – Форма I и Форма II – имеют различия в плотностях, позволяющие рассчитывать на переход из Формы II в Форму I с ростом давления. Целью нашего исследования было изучение влияния давления на полиморфные модификации толазамида в разных средах: в эквимолярной смеси пентана и изопентана, в которой исследуемое вещество не растворяется, и в метаноле, в котором возможна перекристаллизация вещества. Дифракционные эксперименты в различных средах сопровождались DFT-D расчетами оптимизированных структур и энергий для обеих форм толазамида в широком интервале давлений. Ни одна из полиморфных модификаций толазамида не переходит в другую при повышении давления (как минимум, до 6 ГПа) ни в одной из сред. Анализ экспериментальных и оптимизированных расчетными методами структур позволили объяснить этот факт.

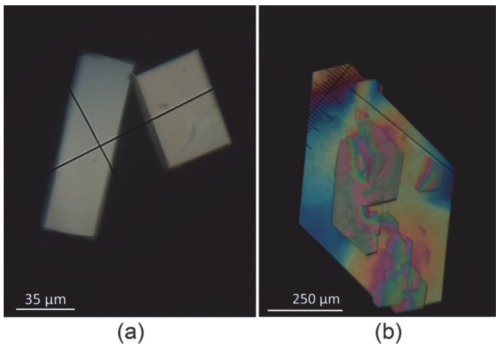


Рис.1. Кристаллы толазамида: а) Форма I; б) Форма II. Фото к.х.н. С.Г. Архипова [1]

Работа поддержана грантом РНФ 14-13-00834 (ИХТТМ СО РАН).

[1] Boldyreva E.V., et al. Isoenergetic Polymorphism: The Puzzle of Tolazamide as a Case Study (2015) Chemistry - A European Journal, 21 (43), pp. 15395-15404.

РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОСКОПИЯ ЕДИНИЧНОЙ ЧАСТИЦЫ. СИМУЛЯЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Худорожков А.А.[1], Розе М.[2], Джигаев Д.А.[2] Вартаньянц И.А.[2,3]

[1] МФТИ(ГУ), г. Долгопрудный, Россия

[2] Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany

[3] НИЯУ «МИФИ», г.Москва, Россия

e-mail: khudorozhkov@phystech.edu

Одним из наиболее распространённых методов для изучения структуры биологических наноразмерных частиц (например, вирусов) является рентгеновская кристаллография. Однако этот метод имеет ряд недостатков, среди которых наиболее существенным является то, что не любая биологическая частица может сформировать кристаллическую структуру. Обойти это ограничение можно с помощью метода рентгеновской микроскопии единичной частицы (single particle imaging), когда она облучается коротким мощным пучком рентгеновского излучения, после чего по полученным дифракционным картинкам можно восстановить структуру частицы. Этот метод стал осуществим после изобретения лазера на свободных электронах [1]. Особенно акутальным он становится в связи с запуском в 2017 году нового лазера на свободных электронах European X-ray Free Electron Laser в Гамбурге [2]. Кроме того, в 2006 году была экспериментально доказана осуществимость этого метода [3].

В данной работе симулируется эксперимент по рентгеновской дифракции на единичной частице (модель вируса Rice Dwarf Virus, взятая из базы данных PDB [4]). По полученным дифракционным картинкам (Рис. 1а) в дальнем поле восстанавливается структура вируса (Рис. 1б). Исследуется зависимость предельно возможного разрешения полученной струкутры от начальных параметров эксперимента (интенсивность излучения, кол-во дифракционных картинок при различных ориентациях вируса, наличие шума).

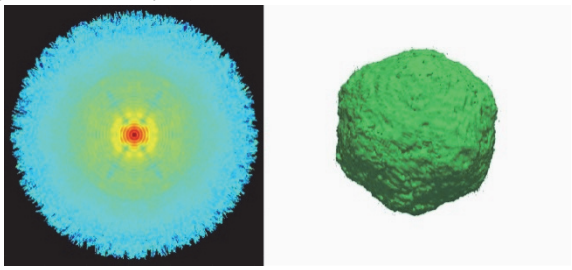


Рис.1. (а) Дифракционная картинка. (б) Реконструированная структура вируса (электронная плотность).

[1] J.M.J. Madey et al. // US Patent 4740973 (1988)

[2] M. Altarelli et al. // Technical Design Report, 97, 1-26 (2006)

[3] H.N. Chapman // Nature Physics, 2(12), 839-843 (2006)

[4] http://www.rcsb.org/pdb

ВЛИЯНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ НА ПОЯВЛЕНИЕ А-ФАЗЫ В MnSi

Чубова Н.М.,[1] Дядькин В.А.,[1,2] Dewhurst Ch.[3],
Григорьев С.В.[1,4]
[1]Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Санкт-Петербург, Россия
[2]Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, Гренобль, Франция
[3]Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция
[4] Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
chubova@lns.pnpi.spb.ru

Методом малоугловой дифракции нейтронов детально изучена область *(H-T)* фазовой диаграммы вблизи критической температуры T_C кубического геликоидального магнетика MnSi [1]. Выбранная геометрия эксперимента позволяет визуализировать одновременно три различных магнитных состояния системы: 1) критические флуктуации с разориентированным волновым вектором спирали k_f, 2) коническую структуру с $k_c \parallel \mathbf{H}$ и 3) гексагональную скирмионную решётку с $k_h \perp \mathbf{H}$. Обнаружено, что скирмионная решётка и коническая структура могут одновременно наблюдаться выше T_C = 29 К на фоне критических флуктуаций. Коническая решетка может быть прослежена вплоть до температур, где корреляционная длина ξ имеет размер порядка одного периода d_s. Скирмионная решётка наблюдается только вблизи T_C и связана с критическими флуктуациями с корреляционной длинной ξ, которая в два раза больше периода спирали d_s. Флуктуации спирали определенны геометрической конфигурацией (размер $\xi \sim d_s$, а магнитное поле приложено перпендикулярно волновому вектору спирали $k_f \perp \mathbf{H}$) и рассматриваются как дефекты, которые образуют и стабилизируют скирмионную решетку.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 14-22-01073-офи_м)

[1] S. V. Grigoriev, N. M. Potapova et al., JETP Letter, 100, 3, 2014

КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ ПРИ ОТРАЖЕНИИ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПУЧКА ЭЛЕКТРОНОВ ОТ ТОНКОЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ

Шкорняков С.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
E-mail: Shkornyakov@mail.ru

Приведен вывод аналитических формул, выполнен расчет по ним и представлена графическая иллюстрация задачи о квантовом размерном эффекте при отражении пучка электронов средней и высокой энергий от тонкой монокристаллической пленки при малом угле скольжения α падающих электронов. В отличие от предыдущей работы [1], здесь учитывается средний внутренний потенциал кристаллической решетки пленки. Предлагаются методы экспериментального наблюдения эффекта. Проводится анализ и обсуждение результатов расчета и методов экспериментального наблюдения явления.

[1] Шкорняков С.М. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.2013. №2. С. 99.

ЯРКИЙ. ЯРЧЕ. УНИКАЛЬНЕЕ - НОВЫЙ МИКРОФОКУСНЫЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ИСТОЧНИК ИЗЛУЧЕНИЯ INCOATEC IMS 3.0 ДЛЯ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Штрикер А., Граф Ю., Визманн И., Михаельзен К.
Incoatec GmbH
E-mail: administration@incoatec.de

Новые микрофокусные рентгеновские трубочки определяют современное применение рентгеновской дифрактометрии, такие как монокристаллическая дифракция, микродифракция и малоугловогое рассеяние. Эти трубочки как правило комбинируют с многослойными рентгеновскими зеркалами, которые являются превосходными оптическими приборами для формирования луча и сохранения яркости источника света.

Микрофокус вращающегося анода генератора обеспечивает плотность потока в диапазоне от 10^{11} фотонов/сек/мм^2 при мощности нагрузки несколько меньше кВт/мм^2. Однако эти источники являются дорогостоящими и требуют регулярного и отнимающего много времени технического обслуживания. Малой мощности закрытые микрофокусные трубочки, такие как INCOATEC IμS, представляют интересную альтернативу низких эксплуатационных расходов по сравнению с вращающимся анодом генератора. Силовые нагрузки нескольких кВт/мм^2 в анодном пятне размером <50 μм обеспечивают небольшой и яркий луч. Плотность потока в диапазоне от 10^{10} фотонов/сек/мм^2 может быть достигнута в сфокусированном пучке подходящим для большинства белковых кристаллов и плохо дифрагирующей небольшие образцы молекулы. IμS доступен для Cr, Co, Cu, Ag и Mo-излучения и обеспечивает луч с FWHM в диапазоне до 100 микрон. С момента своего изготавления в 2006 году были проданы более 730 IμS для большого разнообразия применений в рентгеновской дифрактометрии для биологии, химии, физики и материаловедения.

Последнея генерация IμS, то есть IμS 3.0, является первой микрофокусной рентгеновской трубочкой, которая разработана для рентгеновской дифрактометрии. Новые результаты проектирования позволяют достигнуть прироста интенсивности примерно на 30% по сравнению с предыдущей моделью, то есть IμS High Brilliance.

Мы обсудим основные параметры микрофокусных рентгеновских источников и продемонстрируем, как они влияют на производительность новейшего поколения IμS. Мы представим отдельные результаты, чтобы показать влияние новых IμS 3.0 на качество данных для рентгеновской дифрактометрии.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ОБЛАСТИ МНОГОВОЛНОВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ РЕФЛЕКСОВ В УСЛОВИЯХ ВНЕШНИХ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ НАГРУЗОК

Элиович Я.А.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Просеков П.А.[1,2], Таргонский А.В.[1,2], Аккуратов В.И.[1], Краснов М.П.[1]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: yan.eliovich@gmail.com

Проведены подробные исследования тонкой структуры области многоволнового взаимодействия рентгеновских рефлексов в отсутствии ультразвукового воздействия, а также в условиях внешней ультразвуковой нагрузки на резонансной частоте на примере многоволновой пары рефлексов (220), (371) кристалла парателлурита TeO_2 [1]. Показано, что ультразвуковые колебания существенно изменяют характер многоволнового взаимодействия, причем был предложен метод, позволяющий проводить не только интегральные измерения, но и изучать мгновенные деформации решетки, в том числе – в стробоскопическом режиме, т.е. выделять определенную фазу колебаний кристалла [2]. С помощью этого метода были проведены исследования эволюции локальных деформаций кристаллической решетки в условиях внешней ультразвуковой нагрузки в многоволновой области с помощью регистрации эволюции кривых дифракционного отражения (**КДО**) рентгеновских лучей от монокристаллов парателлурита.

Таким образом, впервые были проведены исследования многоволновой дифракции в кристаллах в условиях внешних ультразвуковых воздействий. В кристалле парателлурита обнаружен эффект существенного изменения картины дифракционного рассеяния в области многоволнового взаимодействия при ультразвуковом воздействии. Установлено, что в фазах максимального растяжения и сжатия картины существенно отличаются друг от друга (см рис. 1). Полученные данные позволили сделать вывод о возможности проведения прецизионных исследований дефектной структуры с помощью предложенного метода.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №14-22-01042 офи_м, 16-32-00714 мол_а, 16-29-14057 офи_м).

[1] Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др. // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 1. С. 1159–1164.

[2] Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др. // ЖЭТФ. 2005. Т.128. Вып. 5(11). С. 893

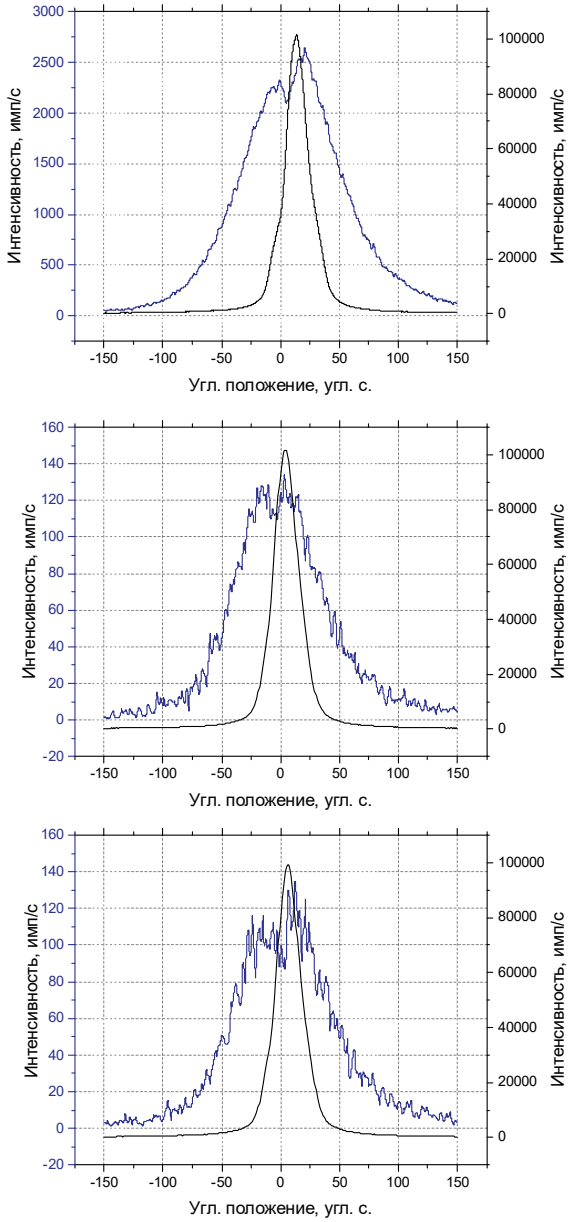


Рисунок 1. Результаты сканирования области многоволновой дифракции для кристалла парателлурита, пара (220, 371), в условиях внешней ультразвуковой нагрузки в интегральном (а), стробоскопическом (фаза -90), (б) и стробоскопическом (фаза +90), (в).

МЕТОД DFA ДЛЯ СТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Яценко Д.А., Цыбуля С.В.
Новосибирский государственный университет
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
e-mail: yatsenko@catalysis.ru

Метод DFA (Debye Function Analysis) основан на формуле Дебая (Debye Scattering Equation - DSE) [1,2], которая позволяет напрямую рассчитать полный профиль порошковой дифрактограммы от любой совокупности атомов (атомная модель):

$$I(2\theta) = P(2\theta)\sum_i\sum_j f_i(2\theta)f_j(2\theta)\frac{\sin(sr_{ij})}{sr_{ij}},$$

где 2θ – угол отражения; $P(2\theta)$ – инструментальные поправки; $f_i(2\theta)$, $f_j(2\theta)$ – рассеивающие факторы атомов i и j, соответственно; r_{ij} – межатомные расстояние между атомами i и j. В отличие от метода Ритвельда DFA является более общим подходом: расчет идет в каждой точке дифракционной картины, а не только под брэгговскими углами, при этом не требуется искусственное размытие дифракционных максимумов и соответственно дополнительных предположений относительно формы и размеров частиц. DSE позволяет также рассчитать межчастичную дифракцию, учесть относительное расположение и различные способы стыковки наночастиц, что делает его пригодным для анализа наноструктурированных образцов. Таким образом, основной задачей для метода DFA является построение адекватных атомной модели структуры наночастицы / наноструктуры, что требует разработки специального программного обеспечения, такого как DIANNA [3] (www.sourceforge.net/projects/dianna), примеры использования которого будут представлены в докладе.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ №14-23-00037

[1] Debye P.// Annalen der Physik, 1915, том 46, № 809, с 809-823

[2] Цыбуля С.В., Яценко Д.А. // Журн. струк. Химии, 2012, том 53, с S150-S165.

[3] Яценко Д.А., Цыбуля С.В. // Изв. РАН. Сер. Физ., 2012, том 76, № 3. с 433–436.

Секция 3. Кристаллография в биологии и медицине

СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА И ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Авдеев М.В.[1,2], Аксенов В.Л.[1,2], Томчук А.В.[1,3], Булавин Л.А.[3]

[1] Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований

[2] Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Физический факультет, Киевский национальный Университет

e-mail: avd@dubna.ru

Детонационные наноалмазы (ДНА) являются одним из продуктов подрыва органических взрывчатых веществ и представляют собой кристаллиты алмаза с характерным размером менее 10 нм. Наличие устойчивых суспензий ДНА в широком диапазоне концентраций (до 10 вес. % и выше) позволяет крайне эффективно применять в структурных исследованиях метод малоуглового рассеяния нейтронов с использованием вариации контраста [1-5]. Показано, что частицы ДНА обладают высокой полидисперсностью по размеру (диапазон от 2 до 10 нм) и обнаруживают неоднородную внутреннюю структуру: наряду с преимущественной алмазной компонентой внутри ДНА на поверхности частиц наблюдается достаточно широкий пространственный переход к графитоподобной оболочке, который отвечает за диффузность поверхности частиц. В жидких дисперсиях ДНА наблюдаются устойчивые и воспроизводимые фрактальные кластеры с широким распределением по размеру от 10 до 100 нм и выше, образующиеся по механизму агрегации с ограниченной диффузией (DLA). Разветвленная структура кластеров обуславливает их перекрытие при вторичной агрегации в концентрированных растворах.

[1] M.V.Avdeev, V.L.Aksenov, L.Rosta // Diam. Relat. Mater., 2007, 16, с 2050-2053.

[2] M.V.Avdeev, N.N.Rozhkova, V.L.Aksenov, et al. // J. Phys. Chem. C, 2009, 113, с 9473–9479

[3] M.V.Avdeev, V.L.Aksenov, O.V.Tomchuk, et al. // J. Phys. Cond. Matter, 2013, 25, 445001

[4] O.V.Tomchuk, L.A.Bulavin, V.L.Aksenov, et al. // J. Appl. Cryst., 2014, 47, с 642–653

[5] O.V.Tomchuk, D.S.Volkov, L.A.Bulavin, et al. // J. Phys. Chem. C, 2015, 119, с 794−802

ИНТЕГРАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ В ИССЛЕДОВАНИИ ХРОМАТИНА

Армеев Г.А.[1], Шайтан А.К.[1]

[1] Биологический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова

e-mail: armeev@molsim.org

Ядерная ДНК высших эукариот отличается высокой степенью компактизации. Отрицательно заряженная ДНК в ядре связана с положительно заряженными гистонами, образуя нуклеосомы. На уровне единичных нуклеосом происходит тонкая регуляция работы генетического аппарата клетки [1]. Изучение конформационной подвижности нуклеосом и их комплексов может пролить свет на механизмы прохождения множества биологических процессов.

На данный момент, одной из крупнейших структур, полученной методом рентгеноструктурного анализа (РСА), является комплекс из четырех нуклеосом [2]. Хроматиновые фибриллы трудно изучать при помощи РСА, так как структуры такого размера крайне сложно кристаллизовать. Недостающую структурную информацию можно получать косвенно биофизическими и биохимическими методами, например, методом ферстеровского резонансного переноса энергии (FRET), методом футпринтинга ДНК или методом криоэлектронной микроскопии [3]. В работе обсуждается интегративный подход к моделированию нуклеосом, для исследования их конформационных изменений при связывании с другими белками.

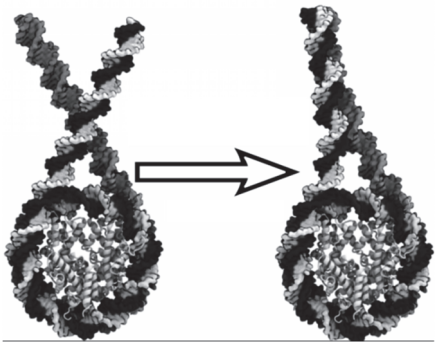


Рис.1. Результат моделирования конфигурации хроматосомы на основании данных гироксильного футпринтинга и ферстеровского резонансного переноса энергии.

[1] Shaytan, A.K., Landsman, D., Panchenko, A.R.// Curr Opin Struct Biol, 2015, N 32, P. 48-57

[2] Schalch T., Duda S., Sargent D.F., Richmond T.J. // Nature. 2005. Vol. 436. N 7047. P. 138–141.

[3] Armeev, G.A., Shaitan, K.V., Shaytan, A.K. // Mosc Univ Biol Sci Bul, 2016, Vol. 71, N 1, P. 29–33

ВЗАИМОВЯЗЬ СОСТОЯНИЙ СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ДОМЕНОВ МЕМБРАННЫХ БЕЛКОВ I ТИПА

Арсеньев А.С., Бочаров Э.В., Минеев К.С., Надеждин К.Д., Гончарук С.А., Бочарова О.В.
ФГБУН «Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова» РАН
e-mail: aars@nmr.ru

Мембранные белки I типа являются одним из наименее структурно изученных и наиболее интересных с медицинской точки зрения рецепторов. Эти белки содержат большие внутри- и внеклеточные домены, а их трансмембранный (ТМ) домен состоит из одной α-спирали. Большинство мембранных белков I типа являются клеточными рецепторами и активны в виде гомо- или гетеродимерных комплексов. Полноразмерные белки I типа не кристаллизуются, поэтому молекулярные механизмы активации для таких белков описаны на уровне пространственных структур отдельных доменов в различных состояниях. Так, в лаборатории Биомолекулярной ЯМР спектроскопии ИБХ РАН были получены более 10 структур димеров ТМ доменов различных рецепторов данного класса. Однако, отнесение полученных структур изолированных доменов к определённому функциональному состоянию полноразмерного белка является трудновыполнимой задачей и обычно осуществляется на основе косвенных данных, таких, как эффекты от точечных мутаций полноразмерного рецептора. Для выявления взаимосвязи между состояниями отдельных доменов необходимо исследовать пространственную структуру связок из нескольких доменов рецепторов и такие работы в настоящий момент проводятся в лаборатории на примере рецепторов семейств TLR, HER, TNFR. В частности, было изучено влияние цитоплазматических примембранных регионов рецептора TLR4 на структуру и способность к димеризации его ТМ доменов, что позволило объяснить ряд свойств рецептора, описанных в литературе. Была исследована структура и внутримолекулярная подвижность связки из ТМ и внутриклеточного доменов рецептора нейротрофинов p75. Показано, что в различных олигомерных состояниях движения и структура внутриклеточного домена никак не связаны с конформацией ТМ домена, а примембранные регионы рецептора подвижны и имеют неупорядоченную структуру в широком круге сред, имитирующих мембранное окружение, в том числе в липид/белковых нанодисках и липосомах. Результаты позволили опровергнуть предложенный ранее механизм активации рецептора p75 и сформулировать новую гипотезу. Для проведения дальнейших исследований белковых конструкций, содержащих трансмембранный и внутриклеточный домены мембранных белков I типа разработаны новые методики и технологии, в том числе предложены и опробованы новые мембраноподобные среды, применимые для ЯМР-спектроскопии высокого разрешения.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 14-14-00573.

МОДИФИКАЦИЯ СТРУКТУРЫ ТКАНЕЙ ГЛАЗА В НОВЫХ ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ ЛЕЧЕНИЯ ГЛАУКОМЫ И АНОМАЛИЙ РЕФРАКЦИИ

Баум О.И.[1], Омельченко А.И.[1], Большунов А.В.[2], Сипливый В.И.[2], Аветисов С.Э.[2], Касьяненко Е.М.[1], Соболь Э.Н.[1]
[1]Институт Фотонных Технологий Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр» Кристаллография и фотоника»Российской академии наук».
[2]Федеральное Государственное Бюджетное Научное Учреждение Научно Исследовательский Институт Глазных Болезней.
e-mail: baumolga@gmail.com

Представлены два новые лазерные технологии для (1) лечения глаукомы, основанная на создании дополнительных путей оттока внутриглазной жидкости из глаза через так называемые интрасклеральные микроканалы с помощью неразрушающего лазерного воздействия и (2) технология лечения аномалий рефракции, основанная на неинвазивном лазерном изменении поля механических напряжений в роговице глаза.

Метод измерения динамики прошедшего через образцы склеры и роговицы, отраженного и рассеянного света видимого и ИК-диапазонов применяли для определения оптических характеристик тканей глаза. Исследовалась корреляция оптических характеристик с изменением гидропроницаемости склеры и изменением формы роговицы. Патоморфологические исследования проводили с целью изучения особенностей структурных изменений биологических тканей глаза после лазерного воздействия. АФМ исследование продемонстрировало состояние коллагеновой структуры возникновение интрасклеральных микропор и сохранение механических свойств в режиме наноиндентирования для склеры и роговицы.

НЕОБЫЧНАЯ СУБСТРАТНАЯ СПЕЦИФИЧНОСТЬ ТРАНСАМИНАЗЫ РАЗВЕТВЛЕННЫХ АМИНОКИСЛОТ ИЗ АРХЕЙ *THERMOPROTEUS UZONIENSIS* КАК СЛЕДСТВИЕ РЕОРГАНИЗАЦИИ ПЕТЕЛЬ В СУБСТРАТ СВЯЗЫВАЮЩЕМ КАРМАНЕ

Безсуднова Е.Ю.[1], Бойко К.М.[1,2], Суплатов Д.А.[3], Марданов А.В.[1], Николаева А.Ю.[2], Стеханова Т.Н.[1], Равин Н.В.[1], Попов В.О.[1,2]

[1]ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3]Институт Физико-Химической биологии им. А.Н.Белозерского

e-mail: eubez@yandex.ru

Необычная субстратная специфичность обнаружена у трансаминазы из кренархеоты Thermoproteus uzoniensis, которая по последовательности аминокислот и третичной структуре относится к трансаминазам разветвленных L-аминокислот или BCATs (branched-chain amino acid aminotransferases). BCATs катализируют обратимый перенос аминогруппы с природных субстратов –L-изолейцина, L-лейцина и L-валина - на альфа-кетоглутарат. Новая архейная BCAT отличается высокой термостабильностью (активна до 95°C) и необычной специфичностью к положительно заряженным аминокислотам (L-орнитину, L-лизину, L-аргинину и L-гистидину). При этом фермент активен с природными и неприродными разветвленными L-аминокислотами, но неактивен с типичным для BCAT амино акцептором – альфа-кетоглутаратом. Вместо него вторым субстратом в реакции трансаминирования выступают пируват и 2-оксобутират. Нам удалось закристаллизовать BCAT из T. uzoniensis и впервые решить структуру BCAT из археи. Детальный анализ субстрат связывающих карманов выявил отличия в организации активного центра от структуры типичной BCAT из E. coli, активной с альфа-кетоглутаратом. В результате моделирования L-орнитина и L-глутамата в активном центре BCAT из T. uzoniensis обнаружен сайт связывания положительно заряженной боковой группы субстрата (сближенные боковые группы двух глутаматов), найдены структурные изменения в активном центре, способствующие непродуктивному связыванию альфа-кетоглутарата. Работа поддержана грантом РНФ 14-24-00172 и грантом «Thermogene».

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ZAD-ДОМЕНА БЕЛКА SERENDIPITY-D ИЗ D.MELANOGASTER.

Бойко К.М.[1,2], Качалова Г.С.[2], Николаева А.Ю.[1], Бончук А.Н.[3], Георгиев П.Г.[3], Попов В.О.[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2]Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук

[3]Институт биологии гена Российской академии наук

e-mail: kmb@inbi.ras.ru

Пространственная организация генома эукариот контролируется набором специализированных белков, называемых архитектурными [1]. К настоящему моменту механизмы функционирования этих белков остаются слабоизученными. ZAD-домены - домены, ассоциированные с цинковыми пальцами, относятся к белкам этого класса и являются широко распространенным мотивом у белков дрозофилы. Гены, кодирующие такие белки, специфичны для насекомых и широко распространены в их геномах. При этом лишь нескольким генам, кодирующим ZAD-домены, приписана известная функция, и роль ZAD-доменов активно обсуждается. Известна лишь одна пространственная структура ZAD-домена белка Grauzone (GrauZAD) [2].

Нами впервые получена пространственная структура ZAD-домена транскрипционного активатора Serendipity-d (SerdZAD) [3]. Структура была решена при разрешении 3.0Å с использованием метода MAD и атомов цинка в качестве аномальных рассеивателей. Детальный анализ полученной структуры показал, что, несмотря на отсутствие гомологии по первичной последовательности, структуры SerdZAD и GrauZAD имеют схожий фолд, но при этом имеют ряд существенных отличий. Кристаллографические данные позволили также подтвердить гомодимеризацию SerdZAD, показанную ранее другими методами.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства Образования и Науки (Соглашение 14.616.21.0066, уникальный идентификатор проекта - RFMEFI61616X0066).

[1] Maksimenko O., Golovnin A., Georgiev P. // Molecular and cellular biology, 2008, 28, 5469-77.

[2] Jauch R., Bourenkov G.P., Chung H.R., Urlaub H., Reidt U., Jackle H., Wahl M.C. Structure, 2003, 11, 1393-402.

[3] Payre F., Crozatier M., Vincent A. Genes & development, 1994, 8, 2718-28.

СТРУКТУРНЫЕ АСПЕКТЫ ПЕРЕДАЧИ СИГНАЛА РЕЦЕПТОРНЫМИ ТИРОЗИНКИНАЗАМИ

Бочаров Э.В.
ФГБУ науки Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: bon@nmr.ru

Рецепторные тирозинкиназы (РТК), играя ведущую роль в процессах клеточного роста, дифференцировки и адгезии, принимают непосредственное участие в управлении развития и гомеостаза всех тканей организма человека. Необходимым условием передачи биохимических сигналов через плазматическую мембрану является димеризация РТК, сопровождаемая конформационными перестройками всех доменов рецептора, включая лиганд-связывающие, трансмембранные (ТМ) и цитоплазматические киназные. Гетерогенность и подвижность молекул РТК не позволяет получить детальную структуру полноразмерного сигнального комплекса в мембране. Поэтому проводятся структурно-динамические исследования отдельных доменов РТК и их комплексов методами крио-электронной микроскопии, кристаллографии и ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Размеры комплексов ТМ доменов РТК, встроенные в детергентные мицеллы и липидные бицеллы, делают возможным определение их пространственной структуры высокого разрешения, что показано в данной работе на примере ЯМР-исследований димеризации ТМ доменов РТК из различных семейств. Из сопоставления полученных результатов с литературными данными предложен новый механизм передачи сигнала РТК через мембрану клетки посредством аллостерических конформационных переключений, обусловленных изменением белок-липидного и белок-белкового взаимодействий из-за альтернативной димеризации доменов РТК вследствие связывания лиганда. Новые принципы передачи сигнала через мембрану дополняют молекулярные схемы активации РТК, предложенные ранее, и объясняют ряд парадоксов, наблюдаемых при активации РТК дикого типа и с патогенными ТМ мутациями.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-04-07983-а.

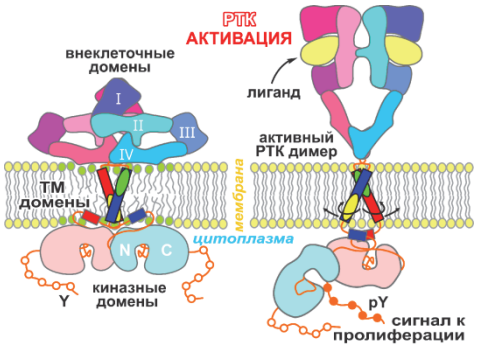


Рис.1. Передача сигнала РТК через мембрану клетки посредством белок-липидного и белок-белкового взаимодействий.

ВЛИЯНИЕ ДЛИНЫ БОКОВОЙ ЦЕПИ НА СТРУКТУРУ САМООРГАНИЗОВАННЫХ МОНО- И ПОЛИСЛОЕВ ЧАСТИЧНО ФТОРИРОВАННЫХ ПОЛИФОСФАЗЕНОВ

Бузин А.И.[1], Brezesinski G.[2], Папков В.С.[3], Чвалун С.Н.[4,1]
[1] *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН*
[2] *Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Golm/Potsdam*
[3] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*
[4] *НИЦ «Курчатовский институт»*
e-mail: buzin@cc.nifhi.ac.ru

Формирование стабильных полислоев непосредственно на границе раздела вода/воздух обнаружено у мезоморфных поли[*бис*-(2,2,3,3-тетрафторпропокси)фосфазена], поли[*бис*-(2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентокси)фосфазена] и поли[*бис*-(2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7-додекафторгептокси)фосфазена]. Данное явление обсуждается с акцентом на *in situ* структурной характеризации методами микроскопии под углом Брюстера, а также синхротронных рентгеновских дифракции при скользящем угле падения и рефлектометрии [1]. В несжатом состоянии изображения под углом Брюстера демонстрируют частичное покрытие поверхности твердообразными островами. Дальнейшее сжатие приводит к формированию однородного монослоя, с последующим формированием полислоев, выражающемся в виде четких ступеней на π-A изотерме. Рентгеновская дифракция при скользящем угле падения демонстрирует наличие только одного дифракционного пика как для монослоя, так и для полислоев, соответствующего мезофазе с межцепным расстоянием d = 12.3, 15.2 и ~17.6 Å для трех исследованных образцов, соответственно. Корреляционная длина в плоскости слоя ξ_{xy} достигает довольно значительной величины в 500 Å. В поли[*бис*-(2,2,3,3-тетрафторпропокси)фосфазене] после формирования четвертого слоя обнаружен переход в трехмерную кристаллическую триклинную фазу с a = 13.19 Å, b = 11.42 Å, c = 4.83 Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 102^\circ$ и $\gamma = 116^\circ$.

[1] Buzin A.I., Brezesinski G., Tur D.R., Papkov V.S., Bakirov A.V., Chvalun S.N. // Macromolecules, 2015, V.***48,*** PP.3327-3336.

НАНО- И МИКРОКАПСУЛЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ СЛОЕВ

Букреева Т.В.[1,2], Бородина Т.Н.[2], Марченко И.В.[1,2], Трушина Д.Б.[1,2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: bukreeva@crys.ras.ru

Многослойные капсулы, получаемые последовательной адсорбцией противоположно заряженных полиэлектролитов на коллоидные частицы-темплаты, представляют собой многофункциональную систему инкапсулирования и доставки лекарственных веществ. Пористые сферические частицы карбоната кальция являются одними из наиболее подходящих темплатов для формирования капсул благодаря своим физико-химическим свойствам. В настоящей работе показана возможность регулировать размер таких частиц в широком диапазоне, меняя условия синтеза, изучены особенности их структуры. Впервые получены полиэлектролитные капсулы из биоразлагаемых полимеров со средним диаметром менее 300 нм на основе частиц карбоната кальция с использованием термоиндуцированного сжатия оболочки. Разработаны способы модификации полиэлектролитных капсул наночастицами металлов и оксидов металлов, а также молекулами красителей, что позволяет осуществить управляемое манипулирование капсулами под действием внешнего магнитного поля и разрушение оболочек капсул с высвобождением инкапсулированного вещества под действием лазерного излучения. Предложен новый подход к формированию нано- и микроконтейнеров для доставки жирорастворимых биоактивных соединений на основе прямых эмульсий с применением низкочастотного ультразвука – образование оболочки контейнеров происходит за счет физико-химических взаимодействий на границе раздела фаз масло/вода, индуцированных ультразвуковой кавитацией.

НАНОСТРУКТУРНЫЙ МЕХАНИЗМ МОДИФИКАЦИОННОЙ АДАПТАЦИИ ПРОТЕОГЛИКАНОВЫХ СИСТЕМ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ И СЛИЗЕЙ

Вазина А.А.[1], Васильев В.Д.[2], Васильева А.А.[1], Васильченко В.А.[3], Забелин А.В.[4], Кваша М.С.[5], Корнеев В.Н.[6], Кулипанов Г.Н.[7], Ланина Н.Ф.[1], Маринский Г.С.[3], Подпрятов С.Е.[3], Подпрятов С.С.[3], Шелестов В.М.[1], Шлектарев В.А.[1]

[1] Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

[2] Институт белка РАН

[3] Институт электросварки им. Е.О. Патона НАН Украины

[4] НИЦ «Курчатовский институт»

[5] Институт нейрохирургии им. А.П. Ромоданова

[6] Институт биофизики клетки РАН

[7] Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН

vazina@mail.ru

Концептуальная революция в области изучения принципов наноструктурной организации вещества обусловлена инструментальной революцией, связанной с развитием новых структурно-физических методов на основе светосильного излучения ускорителей. Представлены экспериментальные результаты многолетних рентгендифракционных исследований структурной организации биологических тканей человека и животных в различных физиологических состояниях, включая онкотрансформацию. На высокоупорядоченных дифракционных картинах слизей и эпителиальных тканей зарегистрированы многочисленные порядки дебаевских колец с основным периодом 4.65(± 0.15) нм, который атрибутирован к протеогликановым системам межклеточного матрикса различных тканей; экспериментально показана наноинвариантность периодичности в широком эволюционном ряду. Выявлена наноструктурная трансформация протеогликановых систем ткани при синергетическом воздействии высокочастотной электрохирургической сварки (изменение температуры, геометрия инструментария, давление, модуляция электромагнитного поля), широко используемой нами в различных клинических операциях. В рамках статистической физики сетчатых полимеров протеогликаны рассматриваются как лабильные системы, способные обеспечить модификационную адаптацию за счет образования обратимых хелатных комплексов с катионами кальция.

Работы поддержаны грантом РФФИ 14-44-03667.

ИММОБИЛИЗАЦИЯ МИКРОВОДОРОСЛЕЙ В СИЛИКАТНУЮ МАТРИЦУ С СОХРАНЕНИЕМ ИХ ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Вознесенский С.С.[1,2], Попик А.Ю[1,2], Гамаюнов Е.Л.[1,2], Маркина Ж.В.[3], Орлова Т.Ю.[3], Постнова И.В.[2,4], Щипунов Ю.А.[2,4]

[1] *Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН*

[2] *Дальневосточный федеральный университет*

[3] *Институт биологии моря ДВО РАН*

[4] *Институт химии ДВО РАН*

e-mail: vss@iacp.dvo.ru

Иммобилизация микроводорослей является прогрессивной методикой и широко используется для их хранения и культивирования, создания биоиндикаторов, химических и экологических сенсоров. В тоже время процесс поиска матриц, которые будут инертны по отношению к биологическим объектам, не теряет актуальности, а исследование влияния иммобилизации микроводорослей на их флуоресцентные характеристики является важной задачей как при изучении свойств иммобилизованных водорослей, так и при создании сенсоров экологического состояния водных объектов.

В докладе приводятся результаты исследований, доказывающие возможность биомиметической иммобилизации культур микроводорослей морского фитопланктона *Porphyridium purpureum* и *Tisochrysis lutea* в силикатную матрицу с сохранением их оптической активности. Полученный органо-неорганический материал обладает оптической прозрачностью и способностью лазерно-индуцированной флуоресценции (ЛИФ). Показано, что иммобилизация микроводорослей значительно увеличивает их стабильность и снижает воздействие температуры на сигнал ЛИФ, в первую очередь, температур, характерных для среды их обитания. Приводятся результаты сравнения спектральных характеристик ЛИФ микроводорослей в водной суспензии и иммобилизованном состоянии при различном температурном воздействии. Увеличение стабильности при температурах выше 30 градусов и отсутствие быстрого разрушения клеточных структур при температуре до 55ºС, позволяет использовать полученные биоминералы в широком диапазоне температур для создания чувствительных элементов сенсорных систем экологического состояния водных объектов.

ДИНАМИКА УПОРЯДОЧЕНИЯ ФОСФОЛИПИДНОГО МУЛЬТИСЛОЯ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗЁМНОГО ГИДРОЗОЛЯ

Волков Ю.О.[1], Асадчиков В.Е.[1], Нуждин А.Д.[1], Рощин Б.С.[1], Тихонов А.М.[2]

[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] *Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН*

e-mail: neko.crys@gmail.com

В работе представлены новые данные о формировании упорядоченного мультислоя фосфолипида на жидкой подложке из кремнезоля — коллоидного раствора наночастиц SiO_2 в воде, стабилизированного NaOH. Были исследованы плёнки 1,2-дистеароил-sn-глицеро-3-фосфохолина (DSPC) [1]. Подложками служили золи Ludox SM-30 (диаметр наночастиц оксида кремния 10±3 нм, объёмная концентрация 30% SiO_2 и 0.2% NaOH, pH ≈ 10) и HS-40 (диаметр наночастиц 12±2 нм, об. конц. 40% SiO_2 и 0.2% NaOH, pH ≈ 9.5) [2]. Строение липидного слоя по глубине было исследовано методом рентгеновской рефлектометрии; измерения угловых зависимостей коэффициента отражения $R(q_z)$ были проведены на лабораторном дифрактометре с подвижной системой излучатель-детектор при энергии излучения $E = 8048$ эВ, степень монохроматизации $\Delta E/E < 10^{-4}$ [3]. Восстановление профиля поляризуемости среды $\chi(z)$ было приведено с применением модельно-независимого подхода, основанного на экстраполяции асимптотического поведения кривых $R(q_z)$ в область больших q_z[4].

Показано, что при нанесении на поверхность кремнезольной подложки толстого слоя фосфолипида наблюдается его стратификация со временем. Общая толщина области упорядочения соответствует длине экранирования Дебая Δ_D для чистой поверхности кремнезоля (400-500 Å) [5]. В пределах 1 часа после нанесения параметры липидной плёнки — электронная концентрация ρ_e и удельная площадь на одну молекулу липида A — соответствуют параметрам жидкой суспензии липидных молекул.

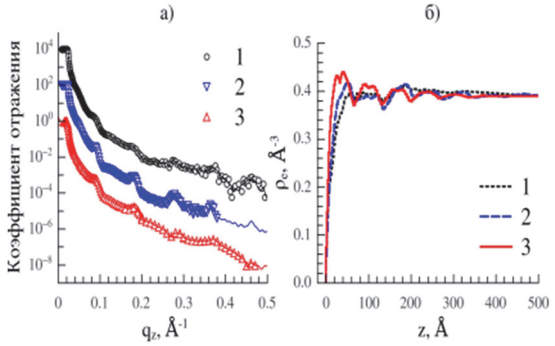


Рис. 1. а) Экспериментальные кривые $R(q_z)$ от липидной плёнки, измеренные спустя 1 час (1), 24 часа (2) и 96 часов (3) после приготовления образца. б) Восстановленные распределения электронной плотности $\rho_e(z)$.

После выдержки в течение 24 часов липидная плёнка формирует формирует периодическую многослойную структуру с характерным периодом d = 68±2 Å, что соответствует толщине кристаллического бислоя липида DSPC. Расчётное значение A = 35.3±1.5 Å^2, что близко к теоретическому значению площади на молекулу A_{2D} для двумерного кристалла DSPC; избыточная электронная концентрация соответствует 6-10 ионам Na^+ (либо молекулам H_2O) на каждую молекулу липида. Спустя 96 часов и более липидная плёнка полностью упорядочена, в структуре обнаруживаются симметрично ориентированные монослои.

[1] D. M. Small, «The Physical Chemistry of Lipids», NY, Plenum Press, 1986, 672 p.

[2] F. Dumont, J. Warlus, A. Watillon // J. Colloid Interface Sci., 1990, v. 138, p. 543.

[3] В. Е. Асадчиков, В. Г. Бабак, А. В. Бузмаков и др. // Приборы и техника эксперимента, 2005, т. 2, с. 1-9.

[4] I. V. Kozhevnikov // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A, 2003, v. 508, p. 519-541.

[5] A. M. Tikhonov // J. Chem. Phys., 2009, v. 130, p. 024512.

МАЛОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ В ИССЛЕДОВАНИИ ЧЕТЫРЕХ ФЕРМЕНТОВ, УЧАСТВУЮЩИХ В МЕТАБОЛИЗМЕ СТАЦИОНАРНОЙ ФАЗЫ РОСТА КЛЕТОК *ESCHERICHIA COLI*

Дадинова Л.А.[1,2], Штыкова Э.В.[1,2], Конарев П.В.[1], Родина Е.В.[2], Воробьева Н.Н.[2], Курилова С.А.[2], Назарова Т.И.[2], Jeffries C.M.[3], Свергун Д.И.[3]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] МГУ им. М.В. Ломоносова

[3] EMBL, Hamburg Outstation, c/o DESY, Hamburg, Germany

e-mail: lubovmsu@mail.ru

Переход бактериальных клеток к стационарной фазе роста сопровождается изменением многих клеточных процессов для обеспечения защитных механизмов против неблагоприятных условий окружающей среды. Исследование возможностей регуляции отдельных белков, участвующих в обмене веществ, а также общих структурных характеристик этих белков имеет большую значимость для понимания регуляции клеточного метаболизма и стрессовых реакций [1]. Методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) в сочетании с другими структурными и биоинформатическими подходами нами были исследованы фруктозо-1,6-бисфосфат альдолаза (FbaB), неорганическая пирофосфатаза (PPase), 5-кето-4-дезоксиуронат изомераза (KduI) и глутамат-декарбоксилаза (GadA), которые участвуют в регуляции метаболизма *E. coli* в стационарной фазе роста клеток. На основе биоинформатических подходов в сочетании с экспериментальными данными МУРР было проведено моделирование третичной и четвертичной структуры белка бактериальной FbaB класса I в растворе. Было показано, что FbaB - фермент с ранее неизвестной структурой – является декамером. Для PPase было установлено, что данный белок в растворе, так же как и в кристалле образует гексамер, но с измененным по сравнению с кристаллической формой взаимным расположением протомеров. В то же время KduI и GadA, хотя преимущественно и образуют гексамеры, существуют в растворе в виде равновесных смесей различных олигомерных форм.

Анализ структуры в растворе отдельных белков, исследованных нами, обеспечивает лучшее понимание их возможных функций в клетке. В частности, наличие и соотношение олигомерных форм, наблюдаемых для KduI и GadA, может зависеть от белков-партнеров, тем самым обеспечивая основу для регулирования их активности.

[1] Bacun-Druzina V., Butorac A. et al. // Food Technol Biotechnol, 2011, V. 49, p. 13–23.

Работа частично поддержана грантом РФФИ (15-54-74002 ЕМБЛ_а)

ПРОПЕПТИДЫ КАК МОДУЛЯТОРЫ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ БЕЛКОВ. МОДЕЛЬ ПРОТЕАЛИЗИНОВ – НОВОЙ ГРУППЫ ТЕРМОЛИЗИНПОДОБНЫХ ПРОТЕОЛИТИЧЕСКИХ ФЕРМЕНТОВ

Демидюк И.В.[1], Куранова И.П.[2], Хайтлина С.Ю[3], Костров С.В.[1,4]

[1]ФГБУН Институт молекулярной генетики РАН

[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3]ФГБУН «Институт цитологии» РАН

[4]НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: kostrov@img.ras.ru

Показано, что одно из наиболее охарактеризованных семейств протеолитических ферментов – термолизинподобные металлопротеиназы на самом деле состоит из двух эволюционных ветвей, представители которых, при высокой гомологии каталитических доменов, содержат два типа пропептидов – «короткие» и «длинные», не имеющих структурного сходства. Нами впервые идентифицирован и детально охарактеризован представитель группы термолизинподобных протеиназ с «короткими» пропептидами из *Serratia proteamaculans* – протеализин.

Предшественник протеализина был закристаллизован и с разрешением 1,8 Å решена его пространственная структура (PDB ID 2VQX, набор дифракционных данных собран в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий).

Анализ структуры предшественника протеализина, а также совокупность полученных дополнительно данных позволяет предполагать, что функционирование термолизинподобных протеиназ in vivo в значительной степени определяется типом пропептида. Одним из наиболее интересных результатов являются данные, указывающие на возможную вовлеченность протеализина в процесс бактериальной инвазии в клетки эукариот. Предполагаемый механизм этого процесса может быть связан с обнаруженной нами способностью протеализина ограниченно гидролизовать G- и F-актин. При этом расщепление протеализином не препятствует полимеризации актина, но сдвигает равновесие в сторону коротких филаментов и мономеров.

КАК ПОЛУЧИТЬ УПОРЯДОЧЕННЫЕ БЕЛКОВЫЕ СТРУКТУРЫ

Дьякова Ю.А., Марченкова М.А., Благов А.Е, Просеков П.А., Писаревский Ю.В., Ковальчук М.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: juliaadi@gmail.com

Кристаллизация белков представляет важную область исследований, при этом весьма трудоемким является поиск условий кристаллизации, который до сих пор проводится методом проб и ошибок.

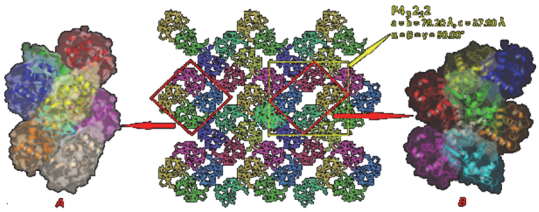


Рис.1. Октамеры молекул лизоцима, построенные на основе структуры кристалла - возможные единицы роста.

Авторами предложен новый подход, позволяющий искать условия кристаллизации, основываясь на информации о структуре растворов на стадии, предшествующей нуклеации.

Подход базируется на моделировании комплексов-олигомеров, являющимися единицами роста и определением концентраций образующихся комплекесов методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) или рентгеновских лучей (МУРР).

Приведены результаты, полученные методами МУРН и МУРР для растворов белка лизоцима. Обнаружено образование димеров и октамеров лизоцима в условиях, соответствующих начальной стадии кристаллизации и исследовано изменение процентного содержания октамеров в растворе в зависимости от концентрации белка, температуры и типа растворителя [1,2].

Показана ключевая роль данных о структуре растворов белка для получения упорядоченных белковых пленок.

С помощью специальной кристаллизационной ячейки проведены *in situ* исследования изменения структуры кристаллов и пленок на основе лизоцима в процессе их роста и деградации [3].

Работа выполнялась при поддержке грантов РФФИ 16-32-60144 мол_а_дк, 15-29-01142 офи_м, 16-29-14053 офи_м.

[1] M.V. Kovalchuk, A.E. Blagov, Yu.A. Dyakova et al. // Cryst. Growth Des. 2016. V. 6. № 4. P. 1792.

[2] М.А. Марченкова, В.В. Волков, А.Е. Благов и др. // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 1. С. 14–19.

[3] Ковальчук М.В., Просеков П.А., Марченкова М.А. и др. // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 5. С. 749–754.

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА КЛЕТОЧНЫХ МЕМБРАН: РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Ефремов Р.Г.
Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
НИУ Высшая школа экономики, Москва
e-mail: r-efremov@yandex.ru

Клеточные мембраны выполняют целый ряд специфических и тонко регулируемых функций, что делает их перспективными с точки зрения создания новых поколений нанообъектов. Функциональная активность биомембран определяется особенностями их структурно-динамических свойств. Одной из нерешенных проблем является недооценка роли эффектов т.н. «мембранного ответа», т.е. реакции водно-липидной среды на взаимодействующие с ней внешние агенты, включая пептиды и белки. Мембрану часто рассматривают как инертную гомогенную среду, однако результаты недавних экспериментальных и вычислительных работ показывают, что клеточные мембраны являются чрезвычайно динамичными системами, причем их действие сильно зависит от локальных (до ~1 нм) особенностей и флуктуаций их структуры, гидрофобных и электрических свойств и т.д. Для исследования мембран разработан эффективный вычислительный подход к анализу на молекулярном уровне структурно-динамических параметров всех компонентов этих мезоскопических систем [1-3]. Установлено что локальные перестройки мембранного окружения играют важную роль при связывании мембрано-активных соединений, вызывая специфическую кластеризацию липидов и инициируя образование дефектов в мембране. Впервые показано, что липиды вносят значительный вклад в энергию димеризации трансмембранных (ТМ) альфа-спиралей, причем процесс их ассоциации имеет преимущественно энтропийный характер [4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-14-00871).

[1] Pyrkova D.V. et al. / Soft Matter, 2011, vol. 7, pp. 2569-2579.

[2] Krylov N.A. et al. / ACS Nano, 2013, vol. 7, pp. 9428-9442.

[3] Chugunov A.O. et al. / Scientific Reports, 2014, vol. 4, 7462.

[4] Volynsky P.E. et al. / J. Amer. Chem. Soc., 2013, vol. 135, pp. 8105-8108.

РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ, ДИФРАКТОМЕТРИЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР С НАНОКРИСТАЛЛАМИ КРЕМНИЯ

Жигунов Д.М.[1], Каменских И.А.[1], Якунин С.Н.[2], Лебедев А.М.[2], Чумаков Р.Г.[2], Камеко Н.О.[1], Кашкаров П.К.[1,2]

[1]*Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова*

[2]*НИЦ «Курчатовский институт»*

e-mail: dmzhigunov@physics.msu.ru

Кремниевые нанокристаллы представляют существенный интерес как с практической, так и с фундаментальной точек зрения. С момента получения и исследования пористого кремния стало очевидно, что уменьшение размеров кремниевых кристаллитов до десятков и единиц нанометров приводит к возможности получения интенсивной фотолюминесценции кремния при комнатной температуре вследствие квантового размерного эффекта [1-2]. Это переводит кремний как основной материал полупроводниковой микроэлектроники в разряд светоизлучающих материалов, результатом чего является возможность создания лазера на основе кремния. Одним из перспективных кандидатов на роль активной среды такого лазера являются многослойные структуры, в которых слои с кремниевыми нанокристаллами чередуются с барьерными слоями, что позволяет прецизионно контролировать размер нанокристаллов и, в конечном счете, управлять их оптическими свойствами [3]. Наибольшее число исследований в этой области посвящено нанокристаллам кремния в матрице диоксида кремния, получаемых в процессе отжига многослойных структур SiO_x/SiO_2. В то же время для эффективной интеграции с существующими планарными кремниевыми технологиями необходима возможность возбуждения электрическим током, существенно ограниченная в таких структурах за счет низкой электропроводности окружающей нанокристаллы Si диэлектрической матрицы SiO_2. Для решения данной проблемы предлагается использовать более узкозонные матрицы, такие как оксинитрид и нитрид кремния.

В работе исследованы структурные свойства многослойных тонких пленок SiO_x/SiO_2, SiO_x/Si_3N_4 и SiN_x/Si_3N_4, осажденных на кремниевые подложки методом плазмохимического осаждения из газовой фазы. Толщина активных слоев SiO_x и SiN_x варьировалась от 1.5 до 5 нм с целью контроля размеров образующихся в этих слоях в процессе отжига нанокристаллов Si, в то время как толщина барьерных слоев SiO_2 и Si_3N_4 была фиксирована для всех образцов и составляла 1 и 1.5 нм, соответственно. Методом рентгеновской рефлектометрии для образцов SiO_x/SiO_2 и SiO_x/Si_3N_4 было продемонстрировано наличие дифракционных пиков, связанных с оптическим контрастом материалов составляющих период многослойной структуры (‘SL’ на рис. 1а). В то же время для многослойных структур SiN_x/Si_3N_4 подобный пик наблюдался только в случае слоев SiN_x с толщиной 5 нм (см. рис. 1б). Отсутствие дифракционных пиков, а, следовательно, и периодичности в системах SiN_x/Si_3N_4 с уменьшением толщины SiN_x (3 и 1.5 нм) может быть связано с диффузионным размытием тонких слоев SiN_x и Si_3N_4, что препятствует эффективному контролю размеров нанокристаллов Si. Анализ экспериментальных данных для образцов SiN_x/Si_3N_4 позволяет сделать вывод, что протяженность интерфейса в таких системах составляет порядка 2-3нм. Таким образом, при отжиге последовательно осажденных слоев SiN_x с толщиной 3 нм и менее и барьерных слоев Si_3N_4 толщиной 1.5 нм происходит практически полное их перемешивание с образованием однородного слоя. В свою очередь формирование нанокристаллов Si в процессе отжига тем не менее происходит и в случае перемешивания, что было продемонстрировано методом рентгеновской дифрактометрии по наличию дифракционных пиков, характерных для кристаллического кремния (рис. 1в). Полученные результаты следует учитывать при формировании нанокристаллов Si сверхмалых размеров в матрице нитрида кремния методом осаждения многослойных структур SiN_x/Si_3N_4.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (соглашение RFMEFI61614X0006).

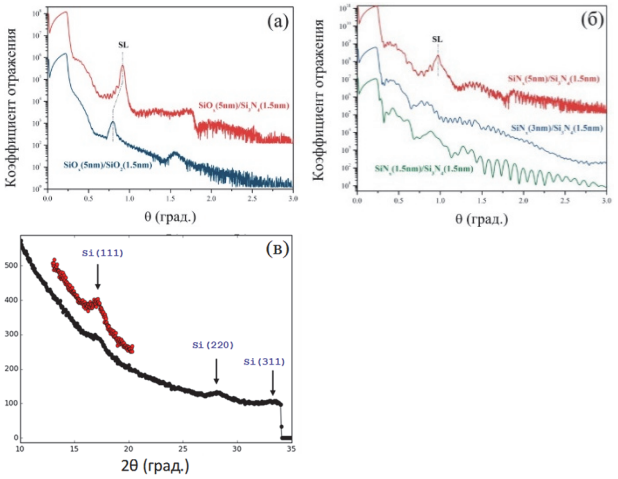


Рис.1. Экспериментальные угловые зависимости коэффициента зеркального отражения от многослойных периодических структур (а) SiO_x/SiO_2 и SiO_x/Si_3N_4 и (б) SiN_x/Si_3N_4 с различными толщинами слоев SiN_x; (в) сканы рентгеновской дифракции многослойной периодической структуры SiN_x/Si_3N_4 с толщиной слоев SiN_x 3 нм.

[1] Canham L.T. // Appl. Phys. Lett., 1990, v. 57, pp.1046-1048.

[2] Кульбачинский В.А. «Двумерные, одномерные, нульмерные структуры и сверхрешетки» // М.: Физ. фак. МГУ (1998).

[3] Zacharias M., Heitmann J., Scholz R., et. al. // Appl. Phys. Lett., 2002, v. 80, p. 661.

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ БАКТЕРИАЛЬНЫХ РИБОСОМ: МЕХАНИЗМ ДЕЙСТВИЯ АНТИБИОТИКОВ

Касацкий П.С.[1,2], Полесскова Е.В.[1], Максимова Е.В.[1,2], Кириллов С.В.[1], Мясников А.Г.[3], Поликанов Ю.В.[4], Остерман И.А.[5], Сергиев П.В.[5], Донцова О.А.[5], Коневега А.Л.[1,2]

[1]Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»

[2]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

[3]Institute of Genetics and of Molecular and Cellular Biology

[4]University of Illinois at Chicago

[5]МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: konevega_al@pnpi.nrcki.ru

В структурно-функциональных исследованиях биосинтеза белка становится очевидной необходимость применения комплексного, междисциплинарного подхода для изучения молекулярного механизма действия рибосом и их специфических ингибиторов – антибиотиков. В структурной биологии произошла смена технологии-лидера: криоэлектронная микроскопия позволяет достигать существенно лучших результатов в исследованиях рибонуклеопротеидных комплексов. Применение мультипараметрической сортировки позволяет получать структуры, соответствующие переходным процессам [1], т.е. изучать «структурную кинетику», и получать структуры со сверхвысоким разрешением [2], превышающим результаты, полученные рентгеноструктурным анализом. Рентгеноструктурный анализ позволяет получать структурные данные о сайтах связывания антибиотиков в рибосоме [3], однако структурная информация зачастую не дает исчерпывающего ответа о молекулярном механизме действия антибиотиков. Функциональный анализ с применением флуоресцентной спектроскопии остановленного потока позволяет определить кинетический механизм и выявить отдельные стадии, на которые действуют ингибиторы.

[1] Fischer, N., Konevega, A.L., и др. // Nature, 2010, том 466, с 329-333.

[2] Fischer, N., Neumann, P., Konevega, A.L., и др. // Nature, 2015, том 520, с 567-70.

[3] Polikanov, Y.S., Osterman, I.A., и др. // Molecular Cell, 2014, том 56, с 531-540.

[4] Работа поддержана грантом РНФ 14-34-00023.

ИЗУЧЕНИЕ БЕЛОК-БЕЛКОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Коваленко И.Б., Федоров В.А., Хрущев С.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Биологический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова

e-mail: ikovalenko78@gmail.com

Проблема белок-белковых взаимодействий чрезвычайно актуальна: методами кристаллографии и ядерного магнитного резонанса получены пространственные структуры множества самых разных белков, однако, знание пространственной структуры само по себе недостаточно для понимания механизмов функционирования белков, в том числе белок-белковых взаимодействий. Современные методы компьютерного моделирования и суперкомпьютеры помогают понять, как сложная пространственная структура макромолекул способствует выполнению их биологических функций.

Разработан метод компьютерного моделирования диффузии и взаимодействия белков в субклеточных компартментах. В предлагаемом подходе используется комбинация методов броуновской и молекулярной динамики, что позволяет моделировать как диффузию и электростатические взаимодействия белков при образовании ими предварительных диффузионно-столкновительных комплексов, так и трансформацию их в финальный комплекс.

Проведенные с использованием компьютерной модели расчеты позволили выявить влияние заряженных аминокислотных остатков, заряда на мембранах, а также параметров среды (ионной силы и pH раствора) на скорость взаимодействия белков в изменении характера белок-белковых взаимодействий, осуществляющих регуляцию интенсивности и направленности электронного транспорта в хлоропласте.

Вычислительные эксперименты проводились с использованием суперкомпьютера Ломоносов в Суперкомпьютерном центре Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Работа поддержана грантами РФФИ 15-07-08927, 14-04-00302 и 15-04-08681.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ АВТОМАТИЧЕСКОЙ СУПЕРПОЗИЦИИ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ

Конарев П.В.[1], Петухов М.В.[2], Свергун Д.И.[2]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] EMBL, Гамбург, Германия
e-mail: konarev@ns.crys.ras.ru

Метод малоуглового рассеяния (МУР) активно используется для изучения биологических систем в растворах наряду с другими структурными методами. Все эти методы позволяют получать трехмерные модели различного разрешения и для проверки результатов требуется проводить их сравнения путем автоматического совмещения объектов.

Ранее была разработана программа SUPCOMB [1], позволяющая совмещать трехмерные модели высокого и низкого разрешения с использованием нормированного коэффициента пространственного несоответствия (NSD) в качестве количественной меры подобия моделей друг другу. Однако расчетное время SUPCOMBa пропорционально произведению числа точек двух объектов, поэтому для больших структур вычисления занимают продолжительное время.

Нами были предложены алгоритмы, позволяющие существенно ускорить расчетное время вычислений для автоматической суперпозиции моделей. В первом случае, была создана модифицированная версия SUPCOMBa, в котором вместо NSD использовался коэффициент взаимного пересечения объемов (NOV) в прямом пространстве. Во втором случае, реализованном в виде программы SUPALM [2], использовался кросс-корреляционный коэффициент (NCC) между амплитудами рассеяния объектов в Фурье пространстве, которые рассчитывались с использованием разложения на сферические гармоники согласно [3]. В результате удалось увеличить быстродействие программ по сравнению с первоначальной версией SUPCOMBa более, чем в 10 раз для структур, содержащих около 10^5 атомов.

[1] Kozin M.B. & Svergun D.I. // Journal of Applied Crystallography, 2000, V. 34, p. 33-41.

[2] Konarev P.V., Petoukhov M.V. & Svergun D.I. // Journal of Applied Crystallography, 2016, V. 49, p. NN1-NN2.

[3] Svergun D.I., Barberato C. & Koch M.H.J // Journal of Applied Crystallography, 1995, V. 28, p. 768-773.

БИОКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ НУКЛЕОИДА БАКТЕРИЙ В УСЛОВИЯХ СТРЕССА.

Крупянский Ю.Ф.,[1] Синицын Д.О.[1], Гуларян С.К.[1], Степанов А.С.[1], Терешкина К.Б.[1], Чуличков А.Л.[1], Лойко Н. Г.[2], Николаев Ю.А.[2], Эль-Регистан Г.И.[2], Попов В.О.[2], Соколова О.С.[3], Шайтан К.В.,[3]. Попов А.[4]
[1]ФГБУН Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН
[2]ФИЦ Биотехнологии РАН
[3]МГУ им. М.В. Ломоносова, Биофак
[4]ESRF, Grenoble.
e-mail: yufk@chph.ras.ru

Известно, что структурные, биохимические и генетические изменения в результате воздействия стрессорных факторов во многом схожи для клеток всех современных организмов, унаследовавших основные стратегии адаптации к различным видам стресса от своих древних предков. В данной работе процесс адаптации будет рассмотрен на простейшем примере нуклеоида бактерий E. Coli.

Экспериментальные исследования, проведенные в последнее время на простейших живых организмах – прокариотических бактериальных клетках показали, что при неблагоприятных условиях среды (например, голодании) бактериальные клетки могут задействовать иной, обычно не свойственный живым системам механизм защиты генетического аппарата (нуклеоида) – биокристаллизацию. Этот механизм помогает избежать повреждения нуклеоида и дает возможность возобновления активности бактериальных клеток в дальнейшем, при улучшении внешних условий. В благоприятных условиях среды упорядоченность внутриклеточных структур поддерживается динамическим способом – путем постоянного расходования свободной энергии (или приобретения, по Э. Шредингеру, отрицательной энтропии), потребляемой с пищей. В случае недостатка питательных веществ поддержание упорядоченности динамическим способом становится невозможным, и бактерии, по-видимому, задействуют энергонезависимый механизм поддержания упорядоченности – биокристаллизацию.

В работе приведены результаты изучения структуры нуклеоида бактерии E.coli (штамм BL21-Gold (DE3)), подвергнутой стрессу голодания с помощью трансмиссионной электронной микроскопии и синхротронного излучения на станции ID-23 ESRF. Исследования проводятся при поддержке Минобрнауки России, проект RFMEFI61616X0070.

ВЛИЯНИЕ ХИМИЗМА СРЕДЫ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МОРФОЛОГИЮ ОКСАЛАТОВ КАЛЬЦИЯ, ОБРАЗОВАВШИХСЯ ПРИ УЧАСТИИ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ГРИБОВ (ПО ДАННЫМ МОДЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА)

Кузьмина М.А., Русаков А.В, Франк-Каменецкая О.В., Власов Д.Ю.
СПбГУ
e-mail: ofrank-kam@mail.ru

В процессе жизнедеятельности микроскопические грибы (микромицеты), обитающие на поверхности горных пород и минералов, выделяют органические кислоты, приводящие к кристаллизации вторичных минералов. Настоящая работа посвящена изучению в условиях эксперимента влияния химического состава среды кристаллизации на образование при участии микромицетов оксалатов кальция (минералов уэдделлита $CaC_2O_4^2$•(2+x) H2O и уэвеллита $CaC_2O_4^2$• H2O).

Кристаллизацию оксалатов кальция проводили из растворов, содержащих добавки органических кислот, выделяемых микромицетами (щавелевой, лимонной, янтарной и фумаровой), а также ряда неорганических компонентов биопленок (Mg^{2+}, K^+, Fe^{3+}, SO_4^{2-}, Cl^-, NO_3^{2-} и PO_4^{3-}).

Кристаллы уэдделлита были получены только в присутствии лимонной кислоты: при 2 ммоль/л – уэдделлит и уэвеллит (рис. 1), выше 6 ммоль/л – только уэдделлит. В присутствии янтарной и фумаровой кислот, а также неорганических примесей (KCl и $MgSO_4$) кристаллизуется только уэвеллит. Кристаллизация уэдделлита происходит при значениях pH среды > 4,5 и высокой нестехиометричности состава раствора.

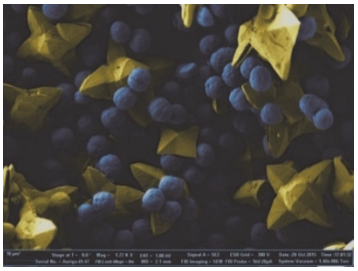


Рис.1. Скелетные кристаллы уэдделлита (жёлтые) и сферолиты уэвеллита (синие), образовавшиеся под действием щавелевой кислоты при наличии в среде кристаллизации лимонной кислоты, а также ионов K^+, Na^+, Mg^{2+}, Cl^-, NO^{3-}, SO_4^{2-}.

Образование граней тетрагональной призмы на кристаллах уэдделлита наблюдалось только в присутствии в растворе цитрат-ионов и $MgSO_4$. В остальных случаях кристаллы уэдделлита ограничены тетрагональной дипирамидой, причем при повышении концентрации Ca^{2+} (при концентрации $C_2O_4^{2-}$ = 3 ммоль/л) наблюдается переход от плоскогранных форм дипирамиды к скелетным формам кристаллов. При этом уэвеллит кристаллизуется в виде мелких сферолитов – шариков белого цвета без кристаллических граней.

Работа проводилась при поддержке гранта РФФИ 16-05-00986А на базе ресурсных центров СПбГУ (РДМИ, МРЦ «Нанотехнологии», МиМ).

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДЛЯ РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ ЗАБОЛЕВАНИЙ ПОЛОСТИ РТА

Кузнецова Ю.О.[1], Фаррахова Д.С.[1], Лощенов В.Б.[1,2]
[1]НИЯУ МИФИ
[2]ИОФ РАН
e-m*ail: JOKuznetsova@mail.ru*

Ранняя диагностика микротрещин эмали зубов имеет большое значение в современной стоматологии для профилактики кариеса. Кристаллические наночастицы являются удобным инструментом для флуоресцентной диагностики, особенно те, которые не флуоресцирует в виде наночастиц, а только тогда, когда молекулы прикрепленные к поверхности наночастиц, располагаются вертикально в процессе взаимодействия с патологической микрофлорой. Также некоторые наночастицы можно использовать для проведения не только флуоресцентной диагностики, но и антимикробной фотодинамической терапии, что особенно важно в условиях устойчивости некоторых микробов к антибиотикам.

В рамках данной работы были проведены исследования по изучению взаимодействия коллоидного раствора наночастиц фталоцианина алюминия (AlPc) при взаимодействии с микрофлорой, содержащейся на эмали человеческих зубов. Также в качестве дополнительного активатора наночастиц были исследованы различные поверхностно - активные вещества (ПАВ).

Экспериментальное исследование взаимодействия наночастиц с поверхностной микрофлорой эмали зубов in vitro показало, что с течением времени происходит увеличение флуоресценции наночастиц AlPc, что свидетельствует о том, что с течением времени увеличивается количество активированных наночастиц. В представленной работе была оценена перспективность использования наночастиц AlPc для детектирования патогенной микрофлоры, а также воспалительных процессов. Совместное использование кристаллических наночастиц AlPc и ПАВов потенциально может позволить увеличить чувствительность методов выявления патологических изменений, в том числе и в эмали зубов.

[1] J. Breymayer, A. Ruck, A. V. Ryabova, V. B. Loschenov, and R. W. Steiner, “Fluorescence investigation of the detachment of aluminum phthalocyanine molecules from aluminum phthalocyanine nanoparticles in monocytes/macrophages and skin cells and their localization in monocytes/macrophages,” Photodiagnosis Photodyn. Ther., vol. 11, no. 3, pp. 380–390, 2014.

БИОМИНЕРАЛИЗАЦИЯ: ПРИРОДНАЯ НАНОТЕХНОЛОГИЯ САМООРГАНИЗАЦИИ ВЕЩЕСТВА

Кульчин Ю.Н.[1], Булгаков В.П.[2]
[1]*Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН*
[2]*Биолого-почвенный институт ДВО РАН*
e-mail: kulchin@iacp.dvo.ru

Развитая в процессе эволюции живыми организмами технология биоминерализации обеспечивает способность синтеза кристаллов в естественных условиях из их ничтожной концентрации в гидросфере и не предъявляет особых требований к чистоте, температуре и кислотности среды. Эта уникальная особенность процесса биоминерализации привлекает пристальное внимание ученых из различных областей знаний, поскольку открывает широкие горизонты для создания новых низкоэнергетичных и экологически чистых биомиметических технологий производства материалов.

Цель доклада - рассмотреть особенности протекающих в живой Природе процессов биоминерализации и возможности их использования для создания биомиметических технологий. Представлены результаты комплексного исследования глубоководных стеклянных морских губок (СМГ), скелет которых построен из биоминерального нанокомпозитного материала - гидратированного кварца [1]. Установлено, что спикулы СМГ обладают светопроводящими свойствами, а их материал имеет высокие оптические и нелинейно-оптические характеристики, что делает его перспективным для фотоники. Приводятся результаты исследований по созданию биомиметической технологии, позволяющей получить новые биоминеральные материалы, оптические и нелинейно-оптические характеристики которых превосходят параметры материала спикул СМГ и обладают новыми свойствами [2]. Из материала спикул выделен белок силикатеин LoSiLA1, ответственный за процесс образования аморфного SiO_2. Разработана технология получения рекомбинантного белка LoSiLA1, которая впервые позволила в лабораторных условиях произвести каталитическое синтезирование нанокристаллов SiO_2[3].

[1] Кульчин Ю.Н.,Вознесенский С.С. и др. Фотоника биоминеральных и биомиметических структур и материалов// М.: Физматлит, 2011.-224 с.

[2] Кульчин Ю.Н. Современная оптика и фотоника нано- и микросистем// М.: Физматлит, 2016.-440 с.

[3] Shkryl Yu.N., Bulgakov V.P. et.al. //Bioprocess Biosyst. Eng. ,2016, V. 39, p.p. 53–58.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР БЕЛКОВ, ВАЖНЫХ ДЛЯ МЕДИЦИНЫ И БИОТЕХНОЛОГИИ

Куранова И.П.
ФИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: inna@ns.crys.ras.ru

Результаты кристаллографических исследований биомакромолекул широко используются для изучения механизмов их функционирования, при поиске инновационных лекарственных средств, для инженерии белков с заданными свойствами.

Кристаллографическое исследование осуществляется в несколько этапов, первым из которых является выращивание кристаллов, дающих чёткую дифракционную картину.

Проведение кристаллизационного эксперимента в условиях невесомости, где отсутствуют конвекционные потоки и транспорт вещества к растущему кристаллу осуществляется посредством диффузии, способствует росту белковых кристаллов высокого дифракционного качества

В докладе рассмотрен ряд экспериментов по выращиванию кристаллов белков в условиях невесомости, проводимых в рамках проекта «Кристаллизатор» с использованием методов свободной и встречной диффузии. Для кристаллизации и рентгеновского исследования были выбраны белки, перспективные для разработки лекарств, а также белки, применяемые при комбинированном химико-ферментативном синтезе аналогов природных нуклеозидов, применяемых при лечении вирусных инфекций.

Представлены пространственные структуры белков, установленные при рентгеноструктурном исследовании выращенных в невесомости кристаллов. Приведены примеры использования результатов структурного исследования для анализа механизмов функционирования белков. Сравнение пространственных структур белка-мишени фосфопантетеин аденилилтрансферазы из *Mycobacterium tuberculosis* в комплексах с функциональными лигандами позволило предложить структурный механизм катализируемой ферментом реакции; при сравнении структур тимидинфосфорилазы в комплексах с субстратом и ингибитором обнаружен новый тип связывания ингибитора, что даёт возможность разрабатывать новые антивирусные препараты.

СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Ламзин В.С.
Европейская Лаборатория Молекуклярной Биологии, Гамбург, Германия
e-mail: victor@embl@hamburg.de

Недавно были опубликованы результаты исследования, которое установило рекорд самого высокого разрешения, полученного методом рентгеноструктурного анализа для биологических макромолекул [1]. Структура белка крамбина была определена до разрешения 0.48 Å – и при этом было получено почти вдвое большее количество экспериментальных данных по сравнении с предыдущими исследованиями. Крамбин представляет собой небольшой белок, состоящий из 46 аминокислот и принадлежащий к семейству токсинов, тионинов. Хотя крамбин и его структура известны уже доаольно давно, белок не обладает какой-либо очевидной ферментативной активностью и его биологическая функция до сих пор достоверно не установлена. Полученная модель высокого разрешения содержит большое количество интересных и важных структурных деталей.

Будет также представлен ряд других белков, для которых рентгеноструктурные данные высокого разрешения позволили понять детали ферментативного катализа и сопровождающихся кооперативных конформационных изменений.

Полученные результаты наглядно демонстрируют возможности современных синхротронных источников рентгеновского разрешения, и позволяют сформулировать еще более сложные задачи, которые могут быть по силам будущим излучателям на основе рентгеновских лазеров на свободных электронах. Совершенно очевидна актуальность дальнейшего развития программного обеспечения и методов интерпретации данных для получения максимально возможной структурной и динамической информации о биологических макромолекулах, и более глубокого понимания их биологической функции.

[1] Schmidt A, Teeter M, Weckert E, Lamzin VS. (2011) Acta Crystallogr. F Struct. Biol. Cryst. Commun. 67, 424-428.

КОНФОРМАЦИОННАЯ ЛАБИЛЬНОСТЬ ЭЛЕМЕНТОВ ТРЁХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ И ДИЗАЙН НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ПИРИМИДИНФОСФОРИЛАЗ СЕМЕЙСТВ NP-I И NP-II

Лашков А.А.[1], Прокофьев И.И.[1], Балаев В.В.[1], Габдулхаков А.Г.[1], Михайлов А.М.[1]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: alashkov83@gmail.com

Пиримидинфосфорилазы (ПФ) – ключевые ферменты нуклеозидного обмена в клетках эу- и прокариот. Ингибиторы и субстраты ПФ используются при лечении онкологических и инфекционных заболеваний.

Методом рентгеноструктурного анализа с использованием источников СИ BESSY II и PETRA III определены пространственные структуры комплексов ПФ с разной субстратной специфичностью семейств NP-I (уридинфосфорилаза из *V.cholerae*) и NP-II (ПФ из *S. typhimurium* и *B. subtilis*).

Для ПФ NP-I семейства при анализе структур атомного разрешения, выявлена зависимость между присутствием лигандов в сайтах связывания и конформацией функционально-значимых областей: петли-шлагбаума L11, β-стрендов S5 и S8. Связывание фосфат-аниона переводит L11, S5, S8 в закрытое (высокоактивное) состояние, тогда как при связывании одних лишь нуклеозидов L11 может находиться в разных конформациях. Экспериментально обнаружены альтернативные положения аминокислотных остатков соответствующие этим состояниям и переходам между ними (рис.1).

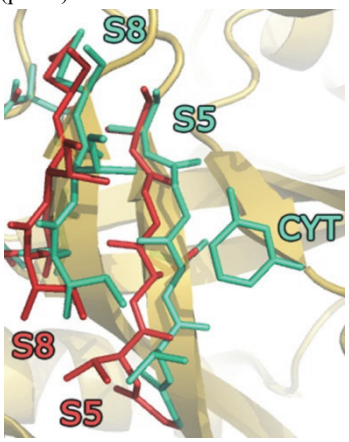


Рис 1. Альтернативные положения элементов структуры комплекса ПФ V.cholerae с цитозином (CYT).

Для ПФ NP-II семейства выявлена связь между конформацией доменов энзима и его субстратной специфичностью. Так, домены тимидинспецифичной ПФ при связывании с субстратами с большей вероятностью переходят в закрытое состояния, чем домены широкоспецифичной ПФ.

Используя информацию о конформационной лабильности структурных элементов ПФ, предложены новые химические формулы регуляторов активности ПФ – потенциальных лекарственных препаратов.

Работа выполнена за счет средств бюджетного финансирования ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-04-00952 а) и гранта Президента РФ (МК-9246.2016.3).

ПОСЛЕДСТВИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ БАКТЕРИЙ НА МИНЕРАЛЬНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ

Липко С.В.[1], Липко И.А.[2], Таусон В.Л.[1], Арсентьев К.Ю.[2], Бабкин Д.Н.[1], Бычинский В.А.[1]

[1] *ФГБУН Институт геохимии им. А.П.Виноградова СО РАН*

[2] *ФГБУН Лимнологический институт СО РАН*

e-mail: lipko@igc.irk.ru

В настоящее время неясно, какое влияние на взаимодействие бактериальных сообществ с пиритом оказывают неавтономные фазы (НФ), образующиеся на поверхностном слое кристалла [1]. Синтезированные кристаллы пирита с различной степенью развития на поверхности НФ, помещались в среду со смесью ацидофильных железобактерий. Продукты опыта анализировали на сканирующем мульти-микроскопе СММ-2000 в атомно-силовом режиме и растровом электронном микроскопе FEI Company Quanta 200 с приставкой рентгеновского микроанализа EDAX. Установлено, что поверхность без НФ менее подвержена бактериальному окислению, по сравнению с пиритом, содержащим НФ. Анализ химического состава поверхности позволил установить концентрирование титана на поверхности пирита, вызванное жизнедеятельностью бактерий. Это наблюдение может быть привлечено к интерпретации поведения несовместимых элементов в природных условиях образования пирита.

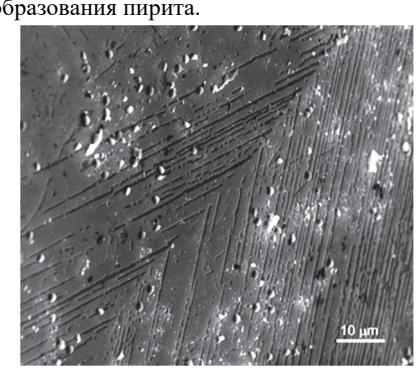


Рис. 1. Результат воздействия бактерий на поверхность кристалла пирита. СЭМ.

Обнаружено, что на изотропных (шлифованных) поверхностях пирита (не содержащих НФ) бактерии располагаются хаотически, тогда как на кристаллах с НФ они выстраиваются в определенных направлениях (рис.1). Полученные характерные морфологические и химические изменения «свежей» поверхности пирита позволят в дальнейшем перейти к решению вопросов о роли биогенных факторов генезиса руд и происхождения жизни на Земле.

Работа поддерживается грантами РФФИ №№ 15-05-05767, 16-35-00102, 15-05-00612.

[1] Таусон В.Л., Бабкин Д.Н., Липко и др. // Докл. РАН, 2016, том 423, № 6, с 801-806.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ ИЗОЛИРОВАННЫМИ ЧАСТИЦАМИ.

Лунин В.Ю.

Институт математических проблем биологии РАН - филиал ФИЦ «ИПМ им. М.В. Келдыша РАН»

e-mail: lunin@impb.psn.ru

Необходимость получения кристаллов исследуемого объекта является лимитирующим фактором в исследованиях биологических макромолекул. Ввод в эксплуатацию рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL) открывает перспективу определения пространственной структуры больших макромолекулярных комплексов (вплоть до целых клеток) по данным рассеяния единичными объектами. Анонсированы первые двумерные и трехмерные экспериментальные наборы данных для таких объектов. В ходе XFEL-эксперимента электронная структура объекта может существенно изменяться, требуя введения соответствующих поправок при проведении расчетов [1]. Дискретизация данных рассеяния изолированной частицей на регулярную сетку в обратном пространстве делает задачу определения структуры этой частицы эквивалентной стандартной кристаллографической задаче: определению структуры по значениям модулей структурных факторов для «воображаемого» кристалла. Это позволяет использовать для определения структуры изолированных частиц разнообразные кристаллографические подходы, в частности, привлекать для решения фазовой проблемы свойства связности областей высокой электронной плотности в макромолекулах [2,3]. Уменьшение шага дискретизации данных приводит к увеличению объема экспериментальной информации, существенно облегчая решение фазовой проблемы.

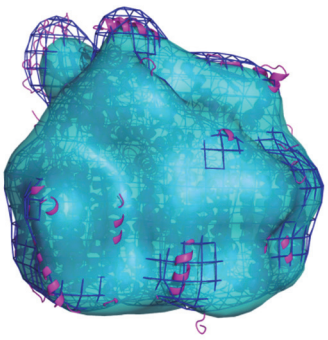


Рис.1. Тестовое определение [3] маски частицы (поверхность) для комплекса фотосистемы II (3KZIб [4]) . «Сеткой» показан точный синтез Фурье разрешения 25 Å.

[1] Lunin V.Y. et al. // Acta Cryst. D, 2015, v 71, p 293-303.

[2] Лунина Н.Л. и др. // Математическая биология и биоинформатика, 2015, том 10, № 2, с 508-525.

[3] Lunin V.Y. et al. // Acta Cryst. D, 2016, v 72, p 147-157.

[4] Broser M. et al. // J.Biol. Chem., 2010, v 285, p 26255-26262.

ЛИПИД-БЕЛКОВЫЕ НАНОДИСКИ – ПЕРСПЕКТИВНАЯ СРЕДА ДЛЯ СТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕМБРАННЫХ БЕЛКОВ

Люкманова Е.Н.[1,2], Шенкарев З.О.[2], Долгих Д.А.[1,2], Арсеньев А.С.[2], Кирпичников М.П.[1,2]

[1] Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

[2] Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова, РАН

e-mail: ekaterina-lyukmanova@yandex.ru

Мембраноассоциированные белки (МБ) играют важнейшую роль в выполнении живой клеткой разнообразных биологических функций. Эти молекулы ответственны за энергетические процессы в клетке, межклеточную рецепцию и коммуникацию, а также за работу нервной, эндокринной и иммунной систем высших животных. По современным оценкам мембранные белки составляют до 30% всех белковых последовательностей, закодированных в геноме человека, и служат мишенями для более чем 50% современных лекарств. Несмотря на большое разнообразие и огромную практическую важность МБ, прогресс в их исследованиях чрезвычайно затруднен. Так, например, из более 30,000 известных к настоящему времени пространственных структур белков менее 200 относятся к МБ. Основные трудности в функциональных и структурных исследованиях МБ связаны с тем, что эти биомолекулы обладают природной пространственной структурой только в присутствии биологической мембраны или подходящей мембраномоделирующей среды (мембранного миметика). Традиционно используемые мембраномоделирующие среды (мицеллы детергентов, липид/детергентные бицеллы, липидные везикулы) обладают рядом существенных недостатков и во многих случаях не способны полноценно моделировать мембранное окружение или обеспечивать достаточную стабильность инкапсулированного МБ. Кроме того, невозможность получения больших количеств МБ из природных источников, часто делает необходимым применение систем гетерологической продукции и последующей ренатурации (рефолдинга in vitro) с использованием мембраномоделирующих сред.

Альтернативная мембраномоделирующая среда – липид-белковые нанодиски представляет собой дискообразные частицы диаметром от 8 до 12 нм и толщиной 4 нм. Каждая из этих частиц имеет в своем составе регион бислойной мембраны, стабилизированный в растворе несколькими молекулами специального белка – аналога природных аполипопротеинов. Фрагмент липидной мембраны в составе нанодиска сохраняет многие биофизические свойства настоящих бислойных систем, что обуславливает лучшие мембраномоделирующие характеристики по сравнению с классическими мембранными миметиками. В докладе приводятся примеры использования нанодисков для структурных исследований МБ методами ЯМР-спектроскопии и криоэлектронной микроскопии. Кроме того, обсуждаются возможности применения нанодисков в медицине в качестве агентов направленной доставки гидрофобных лекарств и антигенов.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С БИООБЪЕКТАМИ

Макаров В.И.[1], Поминова Д.В.[1], Рябова А.В.[1,2], Лощенов В.Б.[1,2]

[1]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

e-mail: vi.makarov@physics.msu.ru

Использование молекулярных нанокристаллов (МНК) органических молекул фталоцианинов, общепризнанных фотосенсибилизаторов, позволит повысить чувствительность и специфичность оптических методов диагностики. Например, МНК фталоцианина алюминия (МНК-AlPc) водонерастворимы и нетоксичны, но при контакте с опухолевыми или иммунными клетками [1] и патогенной микрофлорой [2] становятся фототоксичными и начинают флуоресцировать.

В настоящей работе исследовался механизм возникновения флуоресценции и фотодинамической активности МНК-AlPc по их оптико-спектральным характеристикам при взаимодействии с различными типами биологического окружения.

Данные рентгено-дифракционного анализа показали, что МНК-AlPc кристаллизуется в триклинной сингонии пространственной группы P1. При взаимодействии МНК-AlPc с клетками (HeLa и THP-1) только около 20% накопленных внутри клеток МНК-AlPc начинают проявлять флуоресцентные свойства, присущие раствору AlPc. Фотодинамическая активность МНК-AlPc после инкубации с клетками сопоставима в сравнении с раствором AlPc. Для AlPc в клетках и тканях после лазерного воздействия отмечается фотобличинг. Для раствора AlPc этот эффект отсутствует, следовательно, появление фотоактивности нельзя объяснить процессом отделения отдельных молекул AlPc от МНК. Для объяснения этого эффекта была предложена модель перехода поверхностных молекул из пара- в орто- положение по отношению к плоскости поверхности МНК-AlPc.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-32-00930 мол_а.

[1] Breymayer J. et al. // Photodiagnosis and Photodynamic Therapy 2014 11(3): 380-390.

[2] S.Yu. Vasilchenko et. al. // J. Biophoton. 2010. T. 3, No. 5–6. P. 336–346.

СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ СЛОЯХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИАНИЛИНА, ПЕРСПЕКТИВНОГО ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ АКТИВНОГО СЛОЯ ОРГАНИЧЕСКОГО МЕМРИСТИВНОГО УСТРОЙСТВА

Малахова Ю.Н.[1,2], Щербань В.В.[2], Коровин А.Н.[1], Лапкин Д.А.[1], Якунин С.Н.[1], Рогачев А.В.[1], Чвалун С.Н.[1,2], Ерохин В.В.[1]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] МИТХТ

e-mail: j.malakhova@mail.ru

Мемристивные устройства – это энергонезависимые электронные элементы с сопротивлением, определяемым историей протекшего заряда. Мемристивные устройства можно приготовить по планарной тонкопленочной технологии. Функциональность таких мемристивных устройств основана на электрохимически контролируемом состоянии окисления полианилиновой пленки. Тонкопленочные органические мемристивные устройства состоят из полианилина и серебряного электрода, разделенных полиэтиленоксидом, допированным ионами лития.

В данной работе планарные тонкопленочные органические мемристивные устройства были приготовлены последовательным осаждением на подложку в титановыми электродами 1) пленки полианилина, 2) слоя электролитной матрицы, допированной ионами лития и 3) хлорсеребряного электрода. Ленгмюровские пленки полианилина были перенесены на твердые подложки методом Ленгмюра-Шефера. Слой полианилина становился проводящим после протонирования перенесенной пленки в растворе HCl или если раствор кислоты был использован в качестве субфазы в ленгмюровской ванне. Структурообразование полианилина в ленгмюровских пленках на поверхности чистой воды или растворов кислот было изучено рентгеновской дифракцией в геометрии скользящего угла падения («Ленгмюр», КИСИ). В ленгмюровских пленках было установлено частичное соответствие кристаллографической решетке EB-I для эмеральдинового основания и ES-II для эмеральдиновой соли.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента для молодых ученых-кандидатов наук (МК-5779.2015.3) и РФФИ (проекты № 16-33-80147 и № 15-29-01324).

[1] Erokhin V., Berzina T., Fontana M.P. Journal of Applied Physics, 2005, 97, 064501.

БИОКРИСТАЛЛОМИКА КАК НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ БИОМЕДИЦИНЫ И ИННОВАЦИОННАЯ ЛЕЧЕБНО-ДИАГНОСТИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Мартусевич А.К.[1-3], Ковалева Л.К.[1]

[1] ГБОУ ВПО Кировская ГМА Минздрава России

[2] ФГБУ «ПФМИЦ» Минздрава России

[3] ФГБОУ ВО «НГСХА»

e-mail: cryst-mart@yandex.ru

Поливалентность современной кристаллографии как интегративной науки предполагает формирование внутри нее различных новых направлений с последующим возможным их обособлением. Подобная ситуация сложилась, когда сравнительно недавно обнаруженная (около 50 лет назад) способность биологических жидкостей организма к образованию особой картины при дегидратации (фации), с одной стороны, продемонстрировала широкие диагностические возможности ее изучения, и, с другой стороны, потребовала разработки специфической методологии и методического аппарата для получения, анализа и применения новых знаний. При этом методы «классической» кристаллографии оказались неподходящими для решения вновь возникших задач. Указанные предпосылки и создали базис для появления биокристалломики – биомедицинского направления, связанного с изучением структуризации биожидкостей и процессов кристаллизации, ассоциированных с функционированием живых организмов.

В настоящее время в России существуют 2 лаборатории, имеющие в своем наименовании термин «биокристалломика», - в Кировской ГМА и в НИИ общей патологии и патофизиологии. Кроме того, разработкой тем, связанных с изучением диагностической значимости кристаллизации и структуризации биожидкостей, занимаются многие другие исследовательские группы на территории РФ и за рубежом. Промежуточным результатом их изысканий служит подтверждение информативности кристаллоскопических методов при широком спектре заболеваний, а также при мониторинге функционально-метаболического статуса организма человека и животных. В то же время многие аспекты и субнаправления биокристалломики остаются лишь слабо очерченными и требуют дальнейших исследований.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МИКРОЧАСТИЦ $CaCO_3$, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТАМИ, С МОДЕЛЬЮ КЛЕТОЧНОЙ МЕМБРАНЫ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДЫ

Миронов Е.П.[1], Марченко И.В.[1,2], Артемов В.В.[1,2], Букреева Т.В.[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: evgenii.mironov@gmail.com

Для применения наноструктурированных микрочастиц $CaCO_3$ в качестве средств доставки лекарств необходимо исследовать взаимодействие разрабатываемых систем с клетками. Такие исследования обычно начинают с экспериментов на моделях клеточных мембран, одной из которых являются монослои Ленгмюра.

В настоящей работе проведена модификация пористых частиц ватерита различными полиэлектролитами и исследовано взаимодействие полученных объектов с ленгмюровским монослоем стеариновой кислоты. Контроль за процессом адсорбции частиц на границе раздела вода/воздух осуществлялся методом π-A изотерм и брюстеровским оптическим микроскопом. Монослои ПАВ с поверхности водной субфазы, содержащей частицы $CaCO_3$, переносили на твердые подложки методом Ленгмюра–Шеффера и исследовали с помощью СЭМ.

Показано существенное влияние полиэлектролитного покрытия частиц ватерита на их взаимодействие с монослоем стеариновой кислоты. Так частицы, модифицированные полиэтиленимином и полидиаллилдиметил-аммонием, слабо взаимодействуют с моделью клеточной мембраны, практически не изменяя структуру монослоя. Микрочастицы $CaCO_3$ без оболочки и с оболочкой из полистиролсульфоната и флуоресцентно меченого полиаллиламина сильнее взаимодействуют с молекулами стеариновой кислоты, в результате чего переносятся на твердые подложки вместе с монослоем (Рис. 1).

Рис. 1 СЭМ изображение монослоя стеариновой ксилоты с микрочастицами CaCO3, перенесенного с поверхности водной субфазы на твердую подложку.

МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ВЫВЕДЕНИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ИЗ МОЗГА КРЫС

Мищенко И.Н.[1,2], Чуев М.А.[1,2], Габбасов Р.Р.[1], Черепанов В.М.[1], Поликарпов М.А.[1], Панченко В.Я.[1]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2]Физико-технологический институт РАН

e-mail: IlyaMischenko@rambler.ru

В настоящей работе представлена методика диагностики железосодержащих наночастиц в живом организме на основе гамма-резонансной спектроскопии [1,2]. На примере перераспределения инородных включений между головным мозгом и органами-фильтрами лабораторных крыс показано, что даже минимальный набор экспериментальных данных, включающий три мессбауэровских спектра поглощения, снятых при разных температурах и во внешнем магнитном поле, позволяет надежно определять количественное содержание наночастиц и продуктов их трансформации на всех этапах деградации в живом организме. Информативность этой методики основана на одновременном анализе экспериментальных данных в реалистичных моделях магнитной динамики наночастиц разной магнитной природы [3,4], в том числе во внешнем магнитном поле [5] и с учётом сверхтонкого электрического квадрупольного взаимодействия [6].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-02-08171.

[1] M.A. Chuev, V.M. Cherepanov et al. // AIP Conf. Proc., 2010, 1311, p. 322–328.

[2] I. Mischenko, M. Chuev // J. Phys.: Conf. Ser., 2012, 345, p. 012026 (1–8).

[3] М.А. Чуев // Письма в ЖЭТФ, 2012, 95, № 6, с. 323–329.

[4] М.А. Чуев // Письма в ЖЭТФ, 2016, 103, № 3, с. 194–199.

[5] М.А. Чуев // ЖЭТФ, 2012, 141, № 4, с. 698–722.

[6] М.А. Чуев // Письма в ЖЭТФ, 2011, 94, № 4, с. 312–317.

КОНФОРМАЦИОННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И БЕЛОК-БЕЛКОВЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫЧЬЕГО СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА В ЖИДКОМ РАСТВОРЕ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ PH И ИОННОЙ СИЛЫ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ, НАБЛЮДАЕМЫЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Молоденский Д.С.[1], Ширшин Е.А.[2], Грузинов А.Ю.[1], Петерс Г.С.[1], Тихонова Т.Н.[2], Старосельский И.А.[1]

[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*

[2] *«Международный лазерный центр» МГУ*

e-mail: d.s.molodenskiy@yandex.ru

Изменения конформации и белок-белковые взаимодействия бычьего сывороточного альбумина (БСА) в жидких растворах под воздействием температуры были изучены методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) при двух значениях pH (7.4 и 9.0) и двух ионных силах (0.1 и 0.5). Мы показали, что анализ двух соседних областей в малоугловой области графиков Гинье [1] позволяет наблюдать процесс плавления белковой макромолекулы одновременно с процессом агрегации БСА, что дает возможность детально исследовать механизм агрегации БСА, вызванной нагревом раствора. Совместно с анализом изменений в функциях парных расстояний P(r), это позволило нам предположить следующую модель температурной агрегации БСА. При комнатной температуре и мономерные, и димерные белковые фракции присутствуют в растворе: для низких концентраций белка (<10 мг/мл) отношение мономерной и димерной фракции (ОМД) близко к 6, это же значение мы получили независимо с помощью экспериментов по эксклюзионной хромотографии. При повышенных концентрациях (20 мг/мл и 40 мг/мл) и комнатной температуре проявляется уменьшение димерной фракции, что согласуется с литературными данными [2]. При дальнейшем нагревании величина ОМД начинает уменьшаться, образование димеров наблюдается раньше, чем плавление белка. При этом образования олигомеров высшего порядка не наблюдается в температурном диапазоне 20-60°C. Вблизи точки плавления БСА появляются агрегаты высших порядков и белковые молекулы испытывают взрывообразную агрегацию. Для описания данного процесса мы использовали обобщенную модель Гинье-Порода [3], использующую для анализа кривую рассеяния МУРР целиком. Высокая ионная сила делает описываемые эффекты более выраженными – скорость образования димеров растет при низких температурах, предположительно из-за частичного экранирования электростатических взаимодействий между белковыми молекулами [4]. При повышении концентрации белка и увеличении pH раствора точка плавления смещается в область более высоких температур, т.е. отталкивающее взаимодействие стабилизирует структуру белка. Предложенная модель была дополнительно проверена с помощью оценки параметров белок-белковых потенциалов взаимодействия, основанной на теории ДЛВО и полученной с помощью процедуры «global fitting» [5]. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-32-00049 мол_а).

[1] Tatzuo Ueki, Mikio Kataoka etc // Biophysical Chemistry, 1985, V.23, pp. 115-124

[2] Leandro Barbosa, Maria Grazia etc // Biophysical Journal, 2010, V.98, pp.147-157

[3] Boualem Hammouda // J. Appl. Cryst., 2010, V.43, pp. 716-719

[4] Fajun Zhang, Maximilian W.A. Skoda etc // J. Phys. Chem., 2007, V.111, pp. 251-259

[5] Francesco Spinozzi, Claudio Ferrero // J. Appl. Cryst, 2014, V.47, pp. 1132-1139

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТРУКТУР НУКЛЕОТИД-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РНК-БЕЛКОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Никулин А.Д., Леконцева Н. В., Михайлина А.О., Никонова Е.Ю., Кравченко О.В., Балобанов В.А., Немчинова М.С., Тищенко С.В.

Институт белка РАН

e-mail: nikulin@vega.protres.ru

Исследование регуляции процессов, в которых задействованы РНК-связывающие белки, занимает важное место в молекулярной биологии. Для их понимания необходимо знать принципы РНК-белкового узнавания. Наиболее полную информацию о взаимодействии белков с другими молекулами дает структура соответствующего комплекса. Использование ЯМР затруднено размерами РНК-белковых комплексов, а их кристаллизация является сложной технической задачей.

Нами было показано [1], что РНК-связывающие белки способны образовывать специфические комплексы с одиночными рибонуклеотидами, причём участок связывания нуклеотида и его ориентация в составе комплекса соответствует таковому в специфически узнаваемой белком РНК. Это позволяет не только идентифицировать участки связывания РНК на поверхности белка, но и выявлять специфичность этих участков к определенным основаниям – урацилу, цитидину, аденину или гуанину.

Метод успешно использован при исследовании РНК-связывающих свойства ряда белков без кристаллизации РНК-белковых комплексов [2]. Для отбраковки сочетаний белок-нуклеотид с низким сродством исследуемых молекул использовали измерение изменения анизотропии флуоресценции нуклеотидов в растворе. Экспериментально определен порог значений констант диссоциации, при котором не образуются устойчивые нуклеотид-белковые комплексы.

В результате разработана комплексная методика исследования участков специфических взаимодействий белков с одноцепочечными РНК с помощью определения структур нуклеотид-белковых комплексов.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 14-14-00496).

[1] Murina V, Lekontseva N, Nikulin A. // Acta Crystallogr, 2013, D69, 1504-1513.

[2] Nikulin A, Mikhailina A, et al. // J Biomol Struct Dyn. 2016, 17, 1-34.

ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЕРХНОСТНО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ С МОДЕЛЬНЫМИ МЕМБРАНАМИ

Новикова Н.Н.[1], Ковальчук М.В.[1], Якунин С.Н.[1], Коновалов О.В.[2], Степина Н.Д.[3], Рогачев А.В.[1,4], Юрьева Э.А.[5], Букреева Т.В.[1,3], Иванова О.С.[6], Баранчиков А.Е.[6], Иванов В.К.[6]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Европейский центр синхротронного излучения

[3] Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

[4] Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ

[5] Научно-исследовательский клинический институт педиатрии имени академика Ю.Е. Вельтищева МЗ РФ

[6] Институт общей и неорганической химии РАН

e-mail: nn-novikova07@yandex.ru

Наночастицы на основе металлов широко применяются в медицине и фармакологии для решения самых разнообразных задач. Однако современные данные о действии наночастиц на отдельные ткани организма неоднозначны и в ряде случаев противоречивы. Одним из подходов к изучению особенностей проникновения наночастиц в клетки организма, является изучение молекулярных механизмов действия наночастиц на структуры клетки, в первую очередь на биологическую мембрану наружной оболочки клетки.

Представленные исследования посвящены изучению механизмов действия наночастиц оксидов металлов на модельные липидные мембраны. Липидный монослой формировали на поверхности коллоидного раствора наночастиц магнетита или диоксида церия. Экспериментальные измерения проводили в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований, а также в Европейском центре синхротронного излучения. Были использованы два взаимодополняющие метода – двумерная дифракция и метод стоячих рентгеновских волн

Полученные результаты свидетельствует, что при взаимодействии наночастиц с липидным монослоем может происходить заметная деформация двумерной решетки монослоя. Важная роль в структурообразовании монослоя принадлежит соединениям, стабилизирующим коллоидный раствор наночастиц: присутствующие в растворе в большой концентрации молекулы стабилизатора (лимонной кислоты) могут изменять его структуру и экранировать монослой от действия наночастиц.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 14-22-01078 и № 16-32-00625).

РЕКОНСТРУКЦИЯ РЕШЕТОК, СФОРМИРОВАННЫХ ТРАНСМЕМБРАННЫМИ ФОТОРЕЦЕПТОРАМИ АРХЕБАКТЕРИЙ, МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Орехов Ф.С.[1,2], Штайнхофф Х.Ю.[1], Энгельхард М.[3], Шайтан К.В.[2]

[1] Физический факультет, университет г. Оснабрюк

[2] Биологический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

[3] Институт молекулярной физиологии им. М. Планка

e-mail: porekhov@uni-osnabrueck.de

Хемо- и фототаксисные системы позволяют микроорганизмам, бактериям и археям, реагировать на градиенты питательных веществ, токсинов, света определенной длины волны и прочих внеклеточных стимулов. Системы таксиса включают: (1) трансмембранные рецепторы, организованные в крупные (до нескольких тысяч отдельных белков) кластеры, (2) решетку, состоящую из киназы CheA и белка-адаптора CheW и присоединенную к цитоплазматическим участкам рецепторов, и (3) подвижного регуляторного белка CheY, который подвергается фосфорилированию киназой CheA и доставляет сигнал к клеточному мотору, изменяя, в конечном счете, режим движения микробной клетки [1].

В фокусе настоящего исследования находится структурная организация фототаксисного аппарата архебактерии *Natronomonas pharaonis*, который отвечает за фотофобную реакцию по отношению к вредному для клеток ультрафиолетовому свету и является одной из самых изученных систем этого класса к настоящему моменту. Рецепторы и рецепторные комплексы, входящие в состав таксисных систем, представляют собой длинные димерные белки, состоящие из ряда доменов. Трансмембранный участок фоторецепторов *N. pharaonis* включает в себя сенсорный родопсин второго типа (*Np*SRII), который после поглощения света определенной длины волны претерпевает конформационную перестройку [2]. На следующем этапе, сигнал передается на трансмембранный участок связанного с родопсином белка-передатчика (*Np*HtrII) и, преодолев цитоплазматический участок белка *Np*HtrII, достигает его цитоплазматического конца, модулируя активность связанной с ним киназы CheA [3].

Индивидуальные димерные рецепторы формируют «тримеры из димеров» (см. Рис. 1), которые, в свою очередь, собираются в крупные трансмембранные кластеры. Такая организация важна для уникальных свойств, проявляемых системами таксиса: многократного усиления и интеграции сигнала, стабильности к различного рода флуктуациям [4]. Кристаллографический анализ является важнейшим источником данных о трехмерной структуре отдельных доменов фоторецепторов. Тем не менее значительная длина рецепторов (~35 нм) и их амфифильная природа не позволяют до настоящего времени получить кристаллы полноразмерных комплексов сенсорного родопсина и белка-передатчика (*Np*SRII:*Np*HtrII). В нашей работе мы использовали различные подходы молекулярного моделирования (моделирование по гомологии, белок-

белковый докинг, классическая и крупно-зернистая молекулярная динамика) для интеграции имеющихся экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа и данных крио-электронной микроскопии в молекулярную модель организации трансмембранной решетки фоторецепторов *Np*SRII:*Np*HtrII. Данная модель позволяет объяснить преимущественно полярную локализацию рецепторных кластеров в клетках, а также предлагает молекулярный механизм аллостерического усиления сигнала на уровне трансмембранной решетки рецепторов.

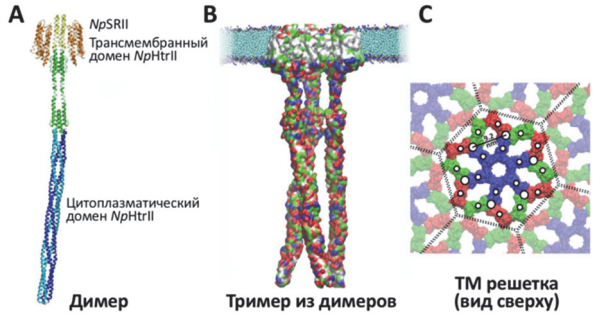


Рис.1. A: Модель индивидуального димера фоторецепторного комплекса NpSRII:NpHtrII. B: Модель тримера из димеров NpSRII:NpHtrII. C: Модель трансмембранного кластера фоторецепторных комплексов. Отдельные димеры изображены красным/синим/зеленым цветом. Пунктирной линией показана гексагональная симметрия решетки.

[1] Klare J. P., Chizhov I., Engelhard M. Microbial rhodopsins: scaffolds for ion pumps, channels, and sensors //Bioenergetics. – Springer Berlin Heidelberg, 2007. – С. 73-122.

[2] Wegener A. A. et al. Structural insights into the early steps of receptor—transducer signal transfer in archaeal phototaxis //The EMBO journal. – 2001. – Т. 20. – №. 19. – С. 5312-5319.

[3] Orekhov P. S. et al. Signaling and Adaptation Modulate the Dynamics of the Photosensoric Complex of Natronomonas pharaonis //PLoS Comput Biol. – 2015. – Т. 11. – №. 10. – С. e1004561.

[4] Sourjik V., Wingreen N. S. Responding to chemical gradients: bacterial chemotaxis //Current opinion in cell biology. – 2012. – Т. 24. – №. 2. – С. 262-268.

НОВАЯ КОНЦЕПЦИЯ УЧАСТИЯ N-КОНЦЕВОГО ДОМЕНА В ФУНКЦИОНИРОВАНИИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СУБЪЕДИНИЦЫ ТЕЛОМЕРАЗЫ, ПРЕДЛОЖЕННАЯ НА ОСНОВЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ TEN *O. PARAPOLYMORPHA*

Петрова О.А.[1], Манцызов А.Б.[2], Родина Е.В.[3], Каллио Й.[4], Ефимов С.В.[5], Клочков В.В.[5], Зверева М.Э.[3], Ламзин В.С.[4], Польшаков В.И.[2], Донцова О.А.[1,3]

[1] НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, МГУ имени М.В. Ломоносова

[2] Факультет фундаментальной медицины МГУ имени М.В. Ломоносова

[3] Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

[4] Европейская Лаборатория Молекулярной Биологии (EMBL)

[5] Институт физики, Казанский федеральный университет

e-mail: dontsova@belozersky.msu.ru

Теломераза – это уникальный вид обратной транскриптазы, которая удлиняет 3'-концы эукариотических хромосом. В минимально активный *in vitro* теломеразный комплекс входят белковая каталитическая субъединица (TERT) и теломеразная РНК (TR). Механизм работы теломеразы практически не охарактеризован. Недостаток экспериментальной базы препятствует построению модели, которая бы описывала взаимодействие всех структурных доменов TERT и компонентов нуклеиновых кислот, входящих в комплекс.

Целью настоящего проекта является получение и характеристика белков, соответствующих структурным доменам TERT дрожжей *O. parapolymorpha*. Задачей данной работы являлось получение пространственной структуры N-концевого домена TERT, или TEN, и характеристика его роли в работе теломеразы.

В результате работы методами ЯМР-спектроскопии и кристаллографии была решена пространственная структура TEN. Установлены структурные элементы TEN, вовлеченные во взаимодействие с фрагментами TR и с гибридным РНК-ДНК дуплексом. На основании полученных результатов предложена модель функционирования TERT, согласно которой, роль TEN заключается в ограничении длины гибридного дуплекса, что облегчает транслокацию TR в активный центр после синтеза теломерного повтора.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант 15-54-74005) и Минобрнауки (лот 2014-14-588-0001).

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ БЕЛКОВ МИКРООРГАНИЗМОВ ИЗ ВЕЧНОЙ МЕРЗЛОТЫ

Петровская Л.Е.[1], Бойко К.М.[2,3], Новотоцкая-Власова К.А.[4], Крюкова Е.А.[1], Николаева А.Ю.[2,3], Корженевский Д.А.[2,3], Попов В.О.[2,3], Ривкина Е.М.[4], Долгих Д.А.[1,5], Горделий В.И.[6], Кирпичников М.П.[1,5]

[1] *Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН*

[2] *Институт биохимии им. А.Н.Баха РАН*

[3]*НИЦ «Курчатовский институт»*

[4] *Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения РАН*

[5]*Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет*

[6]*Московский Физико-Технический Институт*

e-mail: lpetr65@yahoo.com

Микроорганизмы, обитающие в вечной мерзлоте, адаптированы к различным неблагоприятным факторам, включая пониженную температуру и низкую активность воды. Изучение белков таких микроорганизмов позволяет обнаруживать механизмы их адаптации на молекулярном уровне, а также получать материалы с новыми характеристиками для биотехнологического использования.

Нами впервые проведено структурно-функциональное исследование нового ретинального белка *Exiguobacterium sibiricum* (ESR), содержащего остаток Lys96 в качестве донора протонов для Шиффова основания. Установлена пространственная структура ESR с разрешением 2,3 Å. Обнаружен ряд интересных особенностей ESR, в частности расположение остатка Lys96 в гидрофобной полости близко к поверхности белка; нарушение альфа-спиральной структуры в средней части спирали F и наличие водородной связи между остатками His57 и Asp85.

Впервые проведено исследование пространственной структуры эстераз EstPc *Psychrobacter cryohalolentis* и PMGL2, ген которой клонирован из метагеномной библиотеки ДНК вечномерзлого грунта. Проведена биохимическая характеристика свойств полученных белков, демонстрирующая их высокую каталитическую активность при низкой температуре.

Работа проводится при финансовой поддержке грантов РНФ №14-14-01115, РФФИ №14-04-00499, НШ-8384.2016.4, программы РАН «Молекулярная и клеточная биология».

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ВЗАИМОСВЯЗЬ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ

Плетнева Н.В., Плетнев В.З.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук (ИБХ РАН), Москва РАН, 117997, Москва, ГСП-7, ул. Миклухо-Маклая, 16/10

e-mail: nadand@mail.ru

Флуоресцентные белки (ФБ) широко используются в клеточной биологии, биотехнологии и биомедицине в качестве генетически кодируемых флуоресцентных меток при визуализации процессов в живых системах. В 2008 г была присуждена Нобелевская премия по химии за «Открытие и развитие способов применения зеленого флуоресцентного белка». И хотя основной интерес связан с применением ФБ в качестве светящихся репортеров внутриклеточных процессов, важным является изучение механизмов образования хромофоров и их взаимодействий с аминокислотным окружением, которые и определяют разнообразие спектральных свойств ФБ. В большинстве случаев, практическое применение ФБ требует разработки мутантных мономерных вариантов с эмиссией в дальне-красной области спектра, обладающих высоким квантовым выходом, высокой скоростью созревания хромофора и фотостабильностью. В связи с этим, важно понять каким образом особенности стереохимии белка определяют его фотофизические свойства. Эти знания необходимы для разработки рационального подхода по созданию улучшенных вариантов белков, удовлетворяющих требуемым критериям для практического использования. Рентгеноструктурные исследования пространственной организации ФБ на атомном уровне дают важный вклад для успешного решения этой задачи.

СКРЫТАЯ СИММЕТРИЯ МАЛЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ВИРУСОВ И ПРИНЦИПЫ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ «АНОМАЛЬНЫХ» И ДВУХСЛОЙНЫХ ВИРУСНЫХ ОБОЛОЧЕК

Рошаль С.Б.[1], Коневцова О.В.[1], Лорман В.Л.[2]
[1] Южный федеральный университет
[2] Университет Монпелье (Франция)
e-mail: rochal_s@yahoo.fr

Рассмотрены принципы структурной организации сферических капсидов - самособирающихся наноразмерных структур с икосаэдрической симметрией, состоящих из асимметричных белковых молекул. Большинство таких структур удовлетворяет геометрической модели Каспара-Клуга (КК) [1]. Однако последние экспериментальные данные показывают существование «аномальных» капсидов, противоречащих модели [1]. Предложенная нами модификация модели КК позволяет продемонстрировать общий генезис «аномальных» и обычных белковых структур [2]. В отличие от всех предыдущих подходов, мы сохраняем симметрийные принципы [1] моделирования структур сферических капсидов. Мы также отображаем плоский гексагональный порядок на сферу через развертку икосаэдра, но для отображения мы используем простую гексагональную решетку и заполняем протеинами только те ее узлы, которые при ‘склейке’ икосаэдра приобретают тривиальную симметрию. Выявленная скрытая симметрия (в форме локально-периодического гексагонального порядка) является общей для всех малых сферических капсидов. В работе также показана связь между модифицированной моделью КК и теорией двумерной сферической кристаллизации. Введенное понятие соразмерности для концентрических оболочек позволило объяснить особенности организации двухслойных капсидов и предсказать аналогичные, но еще не открытые, вирусные наноструктуры с двойной оболочкой.

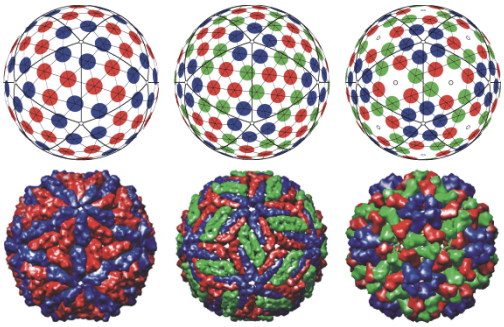


Рис.1. Интерпретация «аномальных» и обычного капсидов (нижний ряд). Узлы сферических решеток (верхний ряд), попадающие на оси симметрии икосаэдра, остаются вакантными.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант №15-12-10004).

[1] D.L.D. Caspar, A. Klug // Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol., 1962, **27**, 1.

[2] S.B. Rochal, O.V. Konevtsova и др. // accepted by Nanoscale, 2016.

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕДЬ-СВЯЗЫВАЮЩИХ ЦЕНТРОВ ЦЕРУЛОПЛАЗМИНА: НОВЫЕ АСПЕКТЫ

Самыгина В.Р.[1,2], Соколов А.В.[3], Буренков Г.[4], Васильев В.Б.[3]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
[3]Институт экспериментальной медицины
[4]Европейская молекулярно-биологическая лаборатория
e-mail: lera@ns.crys.ras.ru

Церулоплазмин (ЦП) является мультифункциональной медной оксидазой, содержащей 95% меди в плазме крови [1]. Первая трехмерная структура ЦП человека была расшифрована с разрешением 3Å [1], позже были сделаны еще две структуры с разрешением до 2.6Å [2]. Мономер ЦП человека состоит из шести доменов и содержит 6-8 ионов меди. Шесть ионов меди всегда связаны с белком в «основных» связывающих центрах. Два иона меди роль которых не ясна могут быть связаны в так называемых «лабильных» связывающих центрах, расположенных в доменах IV и VI. В известных структурах ЦП заполнение этих центров разное. Недавно было показано, что заполнение лабильных центров важно для взаимодействий с фактором миграции макрофагов [3].

В представляемой работе была впервые рсшифрована структура ЦП крысы с разрешением 2.3Å. Белок был закристаллизван в двух кристаллических формах. В ромбической кристаллической форме был обнаружен новый дополнительный лабильный центр связывания меди между доменами II и III, который является уникальной чертой ЦП крысы. В тригональнаой кристаллической форме было обнаружено частичное замещение ионов меди на ионы цинка в основных центрах. Лабильные центры не заполнены. Свойства центров связывания меди обсуждаются.

Работа выполнена с использованием центра коллективного пользования Института кристаллиграфии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН при частичной поддержке грантов РФФИ 14-02-01134 и 15-54-74006.

[1]Zaitseva, I. et al. //J Biol Inorg Chem. 1996, V 1, №1, 15-23.

[2]Самыгина и др. // Кристаллография, 2008, том 53, №4, с 655-662.

[3]Kostevich, V.A. et al. // Biometals, 2015, том 28., №5, с 817-26.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА В АНАЛИЗЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ G БЕЛОК-СОПРЯЖЕННЫХ РЕЦЕПТОРОВ: МЕХАНИЗМЫ АКТИВАЦИИ РЕЦЕПТОРОВ

Сивожелезов В.С.[1], Новиков Г.В.[1], Шайтан К.В.[2]

[1] Институт биофизики клетки РАН

[2] Биологический факультет МГУ им.М.В.Ломоносова

e-mail: vsivo@mail.ru

G белок-сопряженные рецепторы – мишени половины лекарств и объекты мутаций, определяющих врожденные заболевания [1]. Часто считают, что для выяснения механизма активации достаточно провести молекулярно-динамические (МД) расчеты из кристаллографической структуры [2]. Однако это не объясняет конститутивную активность, направленный и обратный агонизм GPCR. Нами изучена корреляция между данными кристаллографии и МД, для чего 100-нс МД-конформации β2-адренорецептора [3,4] были спроектированы на пространство главных компонент, описывающих различия кристаллических структур неактивного и активного рецептора. Сравнение числа и относительного расположения областей блуждания на проекциях для рецептора без лиганда, с прямым и обратным агонистами объяснили упомянутые особенности GPCR. Аналогичные данные получены и для A2□-аденозинового рецептора [5].

Таким образом, связывание лигандов должно приводить к перераспределению предсуществующих конформационных степеней свободы рецептора, что является структурной основой различий между аффинностью и эффективностью лигандов и других особенностей GPCR.

[1] Stevens, R.C., Cherezov, V., et al. //Nature Reviews Drug Discovery, 2013, том 12, № 1, с 25-34.

[2] Shonberg, J., Kling, R.C., et al. //Bioorganic & medicinal chemistry, 2015, том 23, № 14, с 3880-3906.

[3] Novikov, G.V., Sivozhelezov, V.S., Kolesnikov, S.S., & Shaitan, K.V. //Journal of Receptors and Signal Transduction, 2014, том 34, № 2, с 104-118.

[4] Новиков, Г.В., Сивожелезов, В.С., Шайтан, К.В. //Молекулярная биология, 2014, том 48, № 14, с 3880-3906.

[5] Новиков, Г.В., Сивожелезов, В.С., Шайтан, К.В. //Биофизика, 2013, том 58, № 4, с 618-634.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА В АНАЛИЗЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ G БЕЛОК-СОПРЯЖЕННЫХ РЕЦЕПТОРОВ: ПОВЕРХНОСТИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Сивожелезов В.С. [1], Новиков Г.В. [1], Шайтан К.В. [2]

[1] Институт биофизики клетки РАН

[2] Биологический факультет МГУ им.М.В.Ломоносова

e-mail: vsivo@mail.ru

Кристаллография является необходимым инструментом структурных исследований GPCR [1], что в сочетании с молекулярной динамикой является основой изучения конформационного пространства рецепторов, характеризующегося поверхностью свободной энергии [2]. Однако методы кристаллизации GPCR приводят к ограниченности конформаций GPCR, доступных кристаллографии. Нами проведено сравнение всех пространственных структур GPCR по методу [3], и для каждого из GPCR они схожи лишь для неактивных конформаций. Активные конформации одного и того же рецептора часто группируются не друг с другом, а со структурами других рецепторов. Следовательно, для исследования энергетического ландшафта рецепторов необходима МД, но она ограничена временем достижения активной конформации и недостатками в описании липидных мембран.

Преодоление указанных ограничений возможно методами кристаллизации, сохраняющими подвижность рецепторов в кристалле, с использованием рентгеновского излучения на свободно-электронных лазерах (XFEL), которое позволяет получать «мгновенные» структуры [4] для анализа поверхности свободной энергии. В молекулярной динамике оно возможно с использованием принципа минимума средней скорости диссипации энергии [5].

[1] Shonberg, J., Kling, R.C., et al. //Bioorganic & medicinal chemistry, 2015, том 23, № 14, с 3880-3906.

[2] Miao, Y., Nichols, S.E., & McCammon, J.A.//Physical Chemistry Chemical Physics, 2014, том 16, № 14, с 6398-6406.

[3] Новиков, Г.В., Сивожелезов, В.С., Шайтан, К.В. //Биохимия, 2012, том 77, № 5, с 544-554.

[4] Liu, W., Wacker, D., et al. ///Science, 2013, том 342, № 6165, с 1521-1524.

[5] Шайтан, К.В., Ложников, М.А., Кобельков, Г.М.//Биофизика, 2016, том 61, № 4, с 629-637.

О ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛАЗЕРАХ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ В РЕЖИМЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО РАССЕЯНИЯ

Синицын Д.О.[1], Лунин В.Ю.[2], Грум-Гржимайло А.Н.[3], Грызлова Е.В.[3], Лунина Н.Л.[2], Петрова Т.Е.[2], Терешкина К.Б.[1], Степанов А.С.[1], Армеев Г.А.[4], Крупянский Ю.Ф.[1]

[1]Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН
[2]Институт математических проблем биологии РАН
[3]Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова
[4]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет
e-mail: d_sinitsyn@mail.ru

Исследована задача определения структуры биологических макромолекул методом рентгеноструктурного анализа с использованием рентгеновских лазеров на свободных электронах в случае интенсивностей импульсов, на несколько порядков превышающих достигнутые на настоящий момент. При этом вследствие радиационного повреждения за время импульса образец теряет значительную часть электронов, и рассеяние происходит в нестационарном режиме [1]. Путем моделирования изучены возникающие отсюда особенности дифракционных данных [2], которые должны учитываться при их анализе, однако не являются препятствием для определения трехмерных структур. За счет введения вспомогательного вычислительного объекта – эффективного распределения электронной плотности – интерпретация данных нестационарного рассеяния сведена к стандартным методам для стационарного случая. Оценки достижимых разрешений показывают перспективность режима нестационарного рассеяния для определения структуры наиболее сложных объектов – крупных, плохо кристаллизуемых белков и комплексов – с высоким разрешением.

Работа поддержана Минобрнауки (проекты 07.514.11.4126, RFMEFI61616X0070), РФФИ (грант 14-04-31608).

[1] Lunin V.Y., Grum-Grzhimailo A.N. et al. // Acta Cryst. D Biol. Cryst., 2015, D71, 293–303.

[2] Синицын Д.О., Армеев Г.А. // Химическая физика, принята к печати.

ЛАЗЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ СТРУКТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ ПРИ КОРРЕКЦИИ ФОРМЫ И РЕГЕНЕРАЦИИ ХРЯЩЕЙ В ОТОЛАРИНГОЛОГИИ И ОРТОПЕДИИ

Соболь Э.Н.[1], Баум О.И.[1], Омельченко А.И.[1] Сошникова Ю.М.[1], Свистушкин В.М[2], Шехтер А.Б.[2], Белопольская А.В.[3], Басков А.В[3]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] Первый Московский Медицинский Университет
[3]ЦКБ РЖД
e-mail:esobol.rambler.ru

В работе представлено новое направление применение лазеров в медицине - модификация структуры и механических свойств хрящевых тканей – и его применение для коррекции формы хрящей носа, изготовлении хрящевых трансплантатов, восстановления межпозвонковых дисков и лечения остеоартрита. В основу нового подхода положено открытое и исследованное сотрудниками ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН явление лазеро-индуцированной релаксации механических напряжений в биологических тканях. Приведен анализ состояния исследований в данной области и результаты последних лет, в которых основное внимание уделено теоретическому и экспериментальному исследованию процессов структурных изменений, в том числе формированию пористой структуры, модификации околоклеточного матрикса, влияющей на пролиферативную и синтетическую способности хрящевых клеток, активации регенеративных процессов. Особое внимание уделяется физическим механизмам лазерной коррекции формы и регенерации хрящей.

Методами атомно-силовой и электронной микроскопии, структурированной микроскопии высокого разрешения, оптоакустической микроскопии впервые продемонстрировано, что в процессах управляемой модификации структуры тканей существенную роль играют микропоры и пузырьки газа, которые образуются при умеренном лазерном нагреве и, в определенном интервале температур, стабилизируют структуру ткани и обеспечивают долговременность положительных результатов лазерных операций по коррекции формы хрящей носа, и восстановлению хрящей межпозвонковых дисков и суставов.

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛОНГАЦИОННОГО КОМПЛЕКСА, ОСТАНОВЛЕННОГО В ПОЛОЖЕНИИ +24 АКТИВНОГО ЦЕНТРА РНК ПОЛИМЕРАЗЫ *E.coli*

Соколова О.С.[1], Волох О.И.[1], Герасимова Н.[1], Моисеенко А.[1], Кирпичников М.П.[1,2], Студитский В.М.[1,3]
[1]МГУ имени. М.В.Ломоносова, Биологический факультет
2Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
[3]Cancer Epigenetics Program, Fox Chase Cancer Center
email:sokolova@mail.bio.msu.ru

Нарушения ДНК-гистоновых и гистон-гистоновых взаимодействий в результате действия различных факторов способны запускать патологические процессы и снижать жизнеспособность клеток.

В данной работе методами электронной микроскопии макромолекул исследовались две формы элонгационного комплекса (ЭК)+24, образующиеся в ходе транскрипции нативной нуклеосомной ДНК РНК-полимеразой E.coli, и комплекс, образующийся в результате спонтанной остановки транскрипции ДНК с однонитевым разрывом в положении (+12) нуклеосомной ДНК. Трехмерные структуры строились с использованием данных, полученных методами электронной томографии, классической вертикальной съемки и случайного конического наклона (RCT). Полученные трехмерные структуры характеризуются сходной морфологией и состоят из двух соединенных электронных плотностей, соответствующих РНКП *E.coli* и нуклеосоме.

Анализ полученных структур ЭК(+24) показал, что введение однонитевого разрыва в нетранскрибируемую цепь ДНК (+12) приводит к уменьшению расстояния между нуклеосомой и РНКП, что может быть связано с формированием внутринуклеосомной петли ДНК на гистоновом октамере. ☒

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 14-24-00031).

ПРОСВЕТЛЯЮЩИЕ АГЕНТЫ ДЛЯ СТРУКТУРНОЙ ДИАГНОСТИКИ ХРЯЩЕВОЙ ТКАНИ В ОПТИЧЕСКОМ И БЛИЖНЕМ ИК ДИАПАЗОНАХ

Сошникова Ю.М.[1,2], Садовников К.С.[2], Соболь Э.Н.[1]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет
e-mail: yuliasoshnikova@gmail.com

Актуальность работы обусловлена необходимостью контроля глубины поглощения зондирующего лазерного излучения в хряще при его лазерной диагностике и модификации [1]. В работе исследованы биосовместимые вещества (глицерин, омнипак, фруктоза, винная кислота), используемые в медицинской практике, и проанализирована их сравнительная способность обратимо просветлять матрикс хрящевой ткани в видимой и ближней инфракрасной области спектра. Основным механизмом просветления матрикса хряща при использовании указанных веществ, по всей видимости, является вытеснение внутритканевой воды и замена ее на ОН содержащие молекулы вводимого агента. При этом существенно снижается рассеяние лазерного излучения, проходящего через зону хрящевого матрикса, обработанного просветляющим агентом. Эффективность просветления увеличивается при наличии в молекуле просветляющего агента большего числа ОН групп и при отсутствии стерических затруднений для их взаимодействия с молекулами матрикса хряща. При этом в ряде случаев (как для глицерина) наблюдали усадку объема хрящевой ткани, что необходимо учитывать при применении просветляющего вещества в медицинской диагностике.

[1] Sobol E, Milner T., Shekhter A, Baum O, Guller A, Ignatyeva N, Omelchenko A, Zaharkina O. Laser reshaping and regeneration of cartilage // Laser Phys Lett, 2007, vol. 4, №7, 488–502.

ЛАЗЕРНАЯ ИНДУКЦИЯ АДАПТАЦИОННЫХ И РЕГЕНЕРАЦИОННЫХ СИГНАЛЬНЫХ СЕТЕЙ: ИССЛЕДОВАНИЕ ВКЛАДА ЭНДОГЕННЫХ ФОТО- И ТЕРМОРЕЦЕПТОРОВ

Тифлова О.А.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: olantp@gmail.com

Исследовано воздействие красного и ближнего ИК лазерного излучения на животных с модельными опухолями. Построены адаптационные и регенерационные лазерноиндуцированные сети, функционирующие в нормальных и опухолевых клетках. Определение спектральных и кинетических характеристик лазерноиндуцируемых клеточных генно-метаболических сигнальных сетей позволило выявить эффективные фоторецепторы лазерного излучения, гемовые ферменты – глобины и цитохромы, а также термочувствительные компоненты, мембранные микродомены - рафты

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТИОЦИАНАТДЕГИДРОГЕНАЗЫ - НОВОГО МЕДЬ-СОДЕРЖАЩЕГО ФЕРМЕНТА, КАТАЛИЗИРУЮЩЕГО ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ТИОЦИАНАТА У ГАЛОАЛКАЛОФИЛЬНЫХ БАКТЕРИЙ

Тихонова Т.В.[1], Цаллагов С.И.[1], Поляков К.М.[2], Сорокин Д.Ю.[1], Попов В.О.[1,3]

[1] ФИЦ Биотехнологии РАН

[2] Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН

[3] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: ttikh2008@yandex.ru

Фермент тиоцианатдегидрогеназа (TcDH) катализирует окисление тиоцианата с образованием цианата (CNO-) и серы (S^0) с переносом электронов на акцептор.

TcDH – медь-зависимый фермент. Неактивная “as isolated” форма TcDH содержит 0.6-0.8 ионов меди на субъединицу. TcDH активируется солями Cu(II), каталитически активная форма содержит 3–3.5 иона Cu на субъединицу. Дополнительная активация достигается обработкой TcDH солями Cu(I), содержание ионов меди увеличивается до 5-8 на субъединицу.

Методом рентгеноструктурного анализа получены структуры трех форм фермента, содержащие 1 (Структура I, разрешение 1.7 Å), 3 (II, 1.9 Å) и 5 (III, 2.3 Å) ионов меди в активном центре. Все три структуры очень похожи, различия наблюдались в области активного центра. Укладка полипептидной цепи в молекуле TcDH представляет собой 7-лопастный бета-пропеллер. Активный центр расположен в центральной полости бета-пропеллера. Структура I содержит в активном центре 1 ион меди с заселенностью 0.5. В структуре II первый ион меди расположен в том же месте, что и в структуре I, но с заселенностью 1. Второй ион меди расположен на расстоянии 7 Å от первого, что позволяет субстрату связываться между ними. Третий ион меди расположен в канале, соединяющем активный центр с поверхностью молекулы. В структуре III обнаружены 2 дополнительных иона меди. Четвертый ион меди, как и три предыдущих, имеет тетраэдрическую координацию. Пятый ион меди расположен на расстоянии 2.2 Å от второго иона меди в структуре II и имеет плоскую координацию. Такая конфигурация активного центра не была описана ранее для медь-содержащих ферментов. Возможное строение электрон-транспортной цепи у TcDH обсуждается.

Работа была поддержана грантом РНФ № 14-24-00172.

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗРАБОТКИ ТЕХНОЛОГИИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР БИОПОЛИМЕРОВ *IN SILICO* И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С ЕДИНИЧНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ

Шайтан К.В.
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
e-mail: Shaytan49@yandex.ru

Быстрый прогресс технологий в области структурной биологии ставит в повестку дня задачи экспериментального изучения с атомной точностью трехмерной структуры и ее функциональной динамики для биомакромолекулярных объектов в условиях максимально приближенным к естественным условиям их работы в клетке. Это способно существенно повысить ценность получаемой биологической информации и расширить возможности ее практического использования. Необходимым этапом развития структурной биологии в этом направлении являются эксперименты с единичными биополимерными молекулами и их комплексами. Определенные возможности для развития соответствующих методов связаны с перспективами использования рентгеновских лазеров на свободных электронах [1]. При планировании и разработке методов проведения таких экспериментов, а также разработке методов обработки получаемой информации возникает ряд принципиальных вопросов, решение которых требует определенных усилий с использованием методов и достижений самых разных научных дисциплин. Это относится к конструированию объектов исследования [2], сохранности свойств объекта при его доставке в пучок [3], решению обратных задач рассеяния от сложных по структуре объектов и многих других проблем.

В одной работе нет возможности обсуждать весь широкий спектр задач, возникающих в связи с развитием данного перспективного метода. Основное внимание сосредоточено на проблеме предсказания с достаточно высокой степенью вероятности пространственной структуры биополимера, что необходимо для регуляризации обратной задачи рассеяния от многоатомных несимметричных структур. Обсуждение проводится на примере формирования пространственной структуры белков с привлечением современных представлений о формировании этих структур [4], представлениям о многомерной энергетической воронке [5], топологии многомерного энергетического ландшафта макромолекул [6,7], достижениям компьютерных технологий [8] и молекулярной динамики пептидов [8,9], а также сформулированным недавно идеям о вариационном принципе минимума скорости диссипации энергии в процессе фолдинга макромолекул в конденсированной среде [10,11]. Параллельно обсуждаются принципиальные вопросы формирования уникальной пространственной структуры белков.

Автор признателен М.П.Кирпичникову и А.Т.Фоменко за полезные обсуждения и поддержку. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (уникальный идентификатор проекта RFMEFI61614X0003).

[1] Шайтан К.В., Кирпичников М.П., Ламзин В.С., Ильин В.А., Егоров А.М., Молодцов С.Л., Рычев М.В. // Вестник РФФИ, 2013, № 4(80), с. 38-41.

[2] Багров Д.В., Воскобойникова Н.Е., Армеев Г.А., Мосслеи В., Глухов Г.С., Исмагулова Т.Т., Мулкиджанян А.Я., Кирпичников М.П., Штайнхофф Х.-Ю., Шайтан К.В. // Биофизика, 2016, том 61, №6.

[3] Шайтан К.В., Армеев Г.А., Шайтан А.К. // Биофизика, 2016, том 61, №2, с. 213-221.

[4] Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.2002.

[5] Wolynes P.G. // Phil. Trans. Roy. Soc., 2005, v. 363, p.453-467.

[6] Шайтан К.В. // Биофизика, 1994, том 39, №6, с. 949–967.

[7] Shaitan K.V. // in Stochastic Dynamics of Reacting Biomolecules, Ed. by W. Ebeling, L. Schimansky-Gefer, and Y. M. Romanovsky (World Scientific, Singapore, 2003), pp. 283–308.

[8] Piana S., Lindorff-Larsena K., Shaw D.E. // PNAS, 2013, v.110, №15, с.5915-5920.

[9] Шайтан К.В. // Хим.физика, 2014, том 33, №7, с. 53-63.

[10] Шайтан К.В. // Биофизика, 2015, том 60, №5, с. 843-852.

[11] Шайтан К.В., Ложников М.А., Кобельков Г.М. // Биофизика, 2016, том 61, №2, с. 629-637.

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА НУКЛЕОПРОТЕИДНЫХ МУЛЬТИМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ В РАСТВОРЕ, ПУТЕМ ВЕРИФИКАЦИИ СТРУКТУР, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ, В СПЕКТРАХ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ

Швецов А.В.[1,3], Егоров В.В.[1,2], Лебедев Д.В.[1], Коневега А.Л.[1,3], Рычков Г.Н.[1,3], Шмидт А.Е.[1], Илатовский А.В.[1], Назаров И.Б.[5], Касацкий П.С.[1], Конев А.Ю.[1], Клопов Н.В.[1], Полесскова Е.В.[1], Кочнева М.В.[1], Кадочников В.В.[3], Куклин А.И.[4], Онуфриев А.В.[6], Киселев О.И.[2], Исаев-Иванов В.В.[1]
[1]*Петербургский институт ядерной физики НИЦ »Курчатовский институт», Гатчина*
[2]*Научно-исследовательский институт гриппа Минздрава РФ, Санкт-Петербург*
[3]*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет*
[4]*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*
[5]*Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург*
[6]*Вирджинский политехнический университет, Блексбург, США*
e-mail: isaev@omrb.pnpi.spb.ru

Структурно-динамическая диагностика нуклеопротеидных мультимолекулярных комплексов в растворе предполагает, в качестве решения прямой задачи, молекулярное моделирование, как статическое, так и молекулярно- динамическое, а в качестве решения обратной задачи верификацию полученных структур в спектрах

малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния, а также в других экспериментальных методах.

Рибонуклеопротеидные комплексы генома вируса гриппа. Впервые нами были построены полноатомные структуры и рассчитаны траектории МД комплексов белка NP в виде нонамерных колец и палочкообразной структуры с РНК из штамма H3N2 (A/Hong Kong/162/36, далее WT) и H3N2 (A/Hong Kong/162/39, далее E292G), несущего холодоадаптивную термочувствительную точечную мутацию. При анализе траекторий, рассчитанных для дикого типа и мутанта при температурах 299K и 312K, было показано, что степень планарности колец белка NP дикого типа не меняется значительно в зависимости от температуры по всему времени траектории. В тоже время для белка NP, содержащего точечную мутацию E292G, наблюдается зависимость степени планарности кольца в зависимости от температуры. Методом МУРН было проведено сравнительное исследование структуры комплексов нуклеопротеина нормального и холодоадаптивного штаммов вируса гриппа A/HK/1/1968/162/36 и A/HK/1/1968/162/39. Результаты, полученные методом МУРН при температурах 32C и 37C, указывают на потерю NP компактной палочкообразной структуры, что затрудняет интерпретацию результатов. Вместе с тем, данные указывают на значительные различия структурной организации генома вируса гриппа A, вызванные единственной мутацией в белке NP E292G.

Комплексы белков RecA из *D. radiodurans* и *E. Coli.* Нами впервые были рассчитаны траектории МД комплексов филаментов белка RecA с трехнитевой ДНК различного AT, GC состава. При анализе стабильности системы водородных связей в трехнитевой ДНК в составе такого комплекса, оказалось, что в случае C-G*C трехнитевой ДНК система менее стабильна, чем в случае T-A*T ДНК.

Пре- и пост-транслокационные комплексы 70S рибосомы. С целью исследования изменений структуры прокариотических рибосом в процессе перехода между различными функциональными состояниями был впервые проведен эксперимент по измерению МУРР 70S рибосомных частиц из *E.coli* в растворе и их функциональных комплексов с тРНК, а также эксперимент по регистрации кинетики структурных изменений этих комплексов при взаимодействии с кофакторами, путем использования метода остановленного потока (stopped flow) на линии ID02 Европейского Центра Синхротронного Излучения (Гренобль, Франция). Впервые проведены измерения кинетики структурных изменений в рибосомной частице, показывающие возможности метода времяразрешенного МУРН для исследования таких конформационных переходов и перспективность разработки данного метода в кооперации с ESRF.

Частично собранные промежуточные нуклеосомные структуры. Впервые в мире нами были построены полноатомные модели частично собранных нуклеосомных структур: дисомы, тетрасомы, и гексасомы. Построенные модели дали нам возможность по-новому интерпретировать опубликованные в литературе экспериментальные данные, характеризующие структурные и динамические свойства нуклеосомных частиц, полученные методами атомной силовой микроскопии, резонансного переноса энергии флуоресценции, а также данные по защищённости от действия нуклеаз ДНК в активном хроматине.

Четвертичная структура пептидов в белок-белковых взаимодействиях. Создана и описана модельная система, в которой продемонстрирована возможность передачи конформации с помощью коротких пептидов. Полученные результаты не только дополняют и обобщают данные других авторов, относящиеся к индукции конформационных переходов с помощью коротких пептидов, но и позволяют впервые высказать гипотезу относительно механизма данной передачи.

Впервые в мире нами был обнаружен способный к формированию амилоидоподобных фибрилл пептид, соответствующий по аминокислотной последовательности фрагменту поверхностного белка GP вируса Эбола. Полученные результаты позволяют сделать предположение относительно не описанных ранее в литературе механизмов патогенеза заболевания, вызываемого данным вирусом, а также впервые предложить способ создания иммуногенных соединений на основе олигомерных форм данного пептида.

Структурная диагностика гликопротеина глюкоамилазы. Впервые нами были получены спектры МУРН рекомбинантной глюкоамилазы с вариацией контраста. Было оценены плотности рассеяния белковой и гликозидных составляющих белка. Впервые нами была построена предварительная трехмерная модель глюкоамилазы GA1. Полученные данные дополняют результаты других авторов и позволяют строить гипотезе о молекулярных механизмах гидролиза крахмала глюкоамилазой.

Метод позволяющий рассчитывать кривые МУРН по полноатомным траектриям МД с учетом контрастра. Был подготовлен прототип программного обеспечения, адаптированный для рассчета кривых МУРН по полноатомным траекториям МД с учетом контраста. Предложенный нами метод, позволяет получить карты распределения плотности рассеяния нейтронов, а также кривые рассеяния МУРН.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-24-01103 офи_м)

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОТЕНЦИАЛОЗАВИСИМЫХ КАТИОННЫХ КАНАЛОВ МЕТОДАМИ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Шенкарев З.О., Арсеньев А.С.
Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова, РАН
e-mail: zakhar-shenkarev@yandex.ru

Потенциалозависимые катионные (K+, Na+, Ca2+) каналы (Kv, Nav, Cav) играют важную роль в функционировании сердечнососудистой, нервной и мышечной систем организма, в частности, отвечая за проведение нервного импульса. Нарушение работы этих каналов приводит к развитию ряда заболеваний, например, судорожных расстройств, периодического паралича, миотонии, атаксии, аритмий, мигрени и хронической боли. Потенциалозависимые каналы имеют гомологичное модульное строение и состоят из четырех одинаковых субъединиц (Kv) или четырех псевдо-субъединиц в составе слитной полипептидной цепи (α-субъединица Nav и α1-субъединица Cav), окружающих ионную пору. Каждая из (псевдо-)субъединиц включает в себя потенциалочувствительный (рецепторный) домен (ПЧД), сформированный четырьмя трансмембранными (ТМ) спиралями (S1-S4), и фрагмент (S5-S6), участвующий в формировании поры. Функцию датчика ТМ потенциала выполняет спираль S4, которая содержит несколько (обычно 4) консервативных положительно заряженных остатка (Arg или Lys), и, вероятно, значительно изменяет свое положение в мембране под действием электрического поля. Особенное строение имеет потенциалозависимый протонный канал фагоцитов (Hv), который образован двумя ПЧД, каждый из которых способен осуществлять потенциалозависимую проводимость ионов H+. ПЧД каналов являются мишенями для «вольт-сенсорных» токсинов из ядов паукообразных, которые, связываясь с участками домена, погруженными в мембрану, блокируют потенциалозависимую активацию.

Модульная организация потенциалозависимых каналов позволяет предположить, что в некоторых случаях задачи изучения каналов могут быть упрощены и сведены к исследованию фрагментов, содержащих изолированный ПЧД. В докладе приводятся результаты последних структурных исследований как полноразмерных потенциалозависимых каналов, так и их изолированных доменов, полученных с применением современных методов ЯМР-спектроскопии высокого разрешения.

ОПТИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ТКАНЕЙ ГЛАЗА И РЕБЕРНОГО ХРЯЩА ПРИ ЛЕЧЕБНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ С ДЛИНОЙ ВОЛНЫ 1,56 МКМ.

Южаков А.В., Баум О.И., Свиридов А.П., Соболь Э.Н.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
yuzhalvas@gmail.com

Для разработки новых диагностических технологий и подтверждения безопасности использования оптических и термических методов воздействия на биологические ткани необходимы знания об оптических свойствах биологических тканей. На сегодняшний день значения многих параметров исследуемых тканей отсутствуют. Для их определения созданы установки для детектирования прошедшего и отраженного излучений для последующего определения характерных зависимостей и расчета необходимых параметров. Также спекл-интерферометрия является чувствительным методом обнаружения структурных изменений в процессе лазерного воздействия. На основе полученных значений разрабатываются режимы лазерного воздействия и системы контроля нагрева биологических тканей.

PREPARATION AND INVESTIGATION OF LIPODISQ NANOPARTICLES CONTAINING SENSORY RHODOPSIN II AND ITS COGNATE TRANSDUCER FROM *NATRONOMONAS PHARAONIS*

Bagrov D.V.[1], Voskoboynikova N.[2], Armeev G.A.[1], Mosslehy W.[2], Gluhov G.S.[1], Ismagulova T.T.[1], Mulkidjanian A.Y.[2], Kirpichnikov M.P.[1], Steinhoff H.J.[2], Shaitan K.V.[1]
[1] *Department of bioengineering, Faculty of biology, Lomonosov Moscow State University*
[2] *Department of Physics, University of Osnabrück*
e-mail: dbagrov@gmail.com

In recent years, new methods of structure analysis have emerged, including the x-ray free electron lasers (XFEL). The development of these methods is complicated and involves aspects associated with sample preparations and structure stabilization. Recently, a novel membrane mimetic approach was developed, namely, nanoparticles which contain discoidal patches of a lipid bilayer with a diameter of ~ 10 nm stabilized by an amphipathic styrene-maleic acid (SMA) copolymer belt. SMA molecules protect the hydrophobic edges of the patches from the contact with water. Thereby, the central part of the SMA lipid particle (SMALP) can host a membrane protein. Thus, SMALPs can be regarded as prospective containers for individual membrane proteins.

Here, we investigated a photoactive membrane protein complex of the halobacterial sensory rhodopsin with its cognate transducer (*Np*SRII/*Np*HtrII$_{157}$) from *Natronomonas pharaonis* inserted into SMALPs consisting of *Escherichia coli* polar lipids. The SMALPs were characterized by dynamic light scattering, transmission electron microscopy, and atomic force microscopy. The conformation of *Np*SRII/*Np*HtrII$_{157}$ and its functionality were studied by EPR and optical spectroscopic methods. The data obtained allow to consider SMALPs as a prospective platform for single-molecule structural studies of membrane proteins.

СТРУКТУРНЫЕ ОСНОВЫ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ БАКТЕРИАЛЬНЫХ HU БЕЛКОВ

Агапова Ю.К.[1], Алтухов Д.А.[1], Власкина А.В.[1], Корженевский Д.А.[1], Николаева А.Ю.[1], Бойко К.М.[1,3], Бочаров Э.В.[2], Ракитина Т.В.[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2]ИБХ РАН; [3]Институт биохимии им. А.Н.Баха РАН

e-mail:agapova.jk@gmail.com

В бактериях белки, ассоциированные с нуклеотидом (NAPs – nucleoid associated proteis), представляют одну из самых больших групп регуляторов, которые контролируют уплотнение генома, хромосомную архитектуру и различные виды операций, связанных с ДНК, такие как репликация, транскрипция, рекомбинация и репарация.

Особую роль среди NAPs играет гистоноподобный белок HU, который присутствует абсолютно во всех бактериях и является самым высококопийным ДНК связывающим белком. У простейших микроорганизмов, HU белок является единственным NAP.

HU белки – это небольшие (ММ около 10 кДа) положительно заряженные белки, образующие гомо или гетеродимеры и регулирующие различные аспекты жизнедеятельности бактерии. Генетический нокаут генов, кодирующих HU белки, приводит к подавлению роста бактерий и нарушению их способности противостоять различным видам стрессов, а при отсутствии других NAPs - к гибели.

HU белки хорошо экспрессируются в E. Coli, имеют маленький размер и могут быть закристаллизованы, поэтому для их структурных исследований можно использовать как РСА, так и спектроскопию ЯМР. А высокий уровень сходства первичной и пространственной структуры HU белков делают их удобным объектом для изучения зависимости функциональных особенностей макромолекулы от её структуры.

Целью моих исследований было изучение структурных основ термостабильности HU белков. В качестве модельного объекта был выбран HU белок из микоплазмы S. Melliferum(HUSpM), имеющий аномально высокую температуру плавления. Структурные факторы, предположительно определяющие термотолерантность, были установлены путём сравнительного анализа HU белков из термофильных и мезофильных организмов и подтверждены методом точечного мутагенеза.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОРФОЛОГИИ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА КЛЕТОК И ЭМБРИОНОВ МАЛОИНВАЗИВНЫМИ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКИХ ЛОВУШЕК И ФЕМТОСЕКУНДНОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Айбуш А.В., Гостев Ф.Е, Титов А.А., Астафьев А.А., Залесский А.Д., Сырчина М.С., Осыченко А.А., Шахов А.М., Костров А.Н., Серобян Г.А., Надточенко В.А.

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

e-mail: arseny.aybush@chph.ras.ru

Актуальной проблемой биотехнологии и медицины является определение морфобиохимического состава клетки/эмбриона; определение с субдифракционным разрешением (десятки-сотни нанометров) морфологии и микрореологии клетки и её органелл. Мы демонстрируем разработанный в ИХФ РАН экспериментальный комплекс фемтосекундной лазерной нанохирургии, который совмещает функции манипулятора лазерных ловушек с функциями фемтосекундного лазерного микроскопа-спектрометра c-CARS и многофотонной флуоресценции. На примере исследования строения хроматина в зародышевых пузырьках (germinal vesicles GV) ооцитов мыши мы показываем возможность методами лазерных ловушек определять вязкостно-эластичные параметры содержимого везикул. Обсуждается связь полученных параметров со структурой хроматина в ооците и со способностью GV ооцитов млекопитающих к созреванию. Нелинейно-оптическая спектроскопия с использованием ультракоротких лазерных импульсов эффективный подход для изучения морфологии и химического состава клеток, поскольку: (i) сигнал генерируется в основном из области фокусировки световых пучков, что обуславливает высокое пространственное разрешение; (ii) высокая пиковая интенсивность ультракоротких лазерных импульсов наряду с невысокой средней энергией импульса обеспечивают высокую эффективность нелинейно-оптического процесса и одновременно с этим позволяют избежать термического стресса объекта. Низкий термический стресс обеспечивает сохранность и выживаемость клетки. В данной работе получены c-CARS 2D сканы GV ооцитов мыши, выявлен морфобиохимический состав GV ооцита.

Работа поддержана грантом РНФ 14-14-00856.

ПОЛУЧЕНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДНК-СВЯЗЫВАЮЩИХ HU БЕЛКОВ ИЗ МИКОПЛАЗМ S. MELLIFERUM И M. GALLISEPTICUM

Алтухов Д.А. [1], Агапова Ю.К. [1], Власкина А.В.[1], Корженевский Д.А. [1], Николаева А.Ю. [1,2], Бойко К.М. [1,3], Бочаров Э.В. [1,4], Ракитина Т.В. [1,4]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

[3] ФГБУ науки Институт биохимии им. А.Н. Баха РАН

[4] ФГБУ науки Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

e-mail: altuhovd@mail.ru

ДНК-связывающие гистоноподобные HU белки – это небольшие (~10 кДа) положительно заряженные белки, относящиеся к классу белков, ассоциированных с бактериальным нуклеоидом и участвующих в поддержании компактизации геномной ДНК прокариот. HU белки присутствуют во всех бактериях и регулируют разнообразные ДНК-зависимые процессы, включая репликацию, транскрипцию, рекомбинацию, репарацию и адаптацию. Показана принципиальная возможность использования HU белов в качестве мишени для фармакологической интервенции для нарушения структуры нуклеоида и жизнеспособность патогенных бактерий, включая микоплазму M. tuberculosis.

В настоящей работе были подобраны условия бактериальной экспрессии 2-х изотопно-меченных рекомбинантных HU белков из микоплазм S. melliferum (HUSpm) и M. gallisepticum (HUMgal), а также оптимальные условия проведения структурно-динамических экспериментов с белками в свободной форме и комплексом с ДНК с помощью спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). В результате, с помощью молекулярного моделирования на основе данных кристаллографии и гетероядерной ЯМР-спектроскопии высокого разрешения установлена пространственная структура и описана внутримолекулярная динамика димеров белков HUSpm и HUMgal. Показано, что при добавлении ДНК-дуплекса JrA25/JrD22 конформация и динамика HU белков претерпевают изменения, что свидетельствует о формировании функционального комплекса.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 15-14-00063).

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ CRG-PVA

Бадранова Г.У., Шаталова А.Ю., Кондратьев О.А., Готовцев П.М., Тихомиров С.А., Василов Р.Г.

НИЦ Курчатовский институт

e-mail: doc.shatalova@mail.ru

Гидрогели сегодня находят широкое применение в разных отраслях, от медицины и косметологии до очистки сточных вод [1] [2]. Кроме того, многие гидрогели могут выступать в роли носителей наночастиц с различными функциональными свойствами [3] [4]. В то же время сами наночастицы оказывают влияние на целый ряд параметров гидрогелей, таких как набухаемость, прочностные характеристики, способность длительно удерживать влагу [2] [4].

Целью данного исследование является изучение влияния биологически безопасных наночастиц на физические свойства гидрогеля на основе биосовместимых компонентов: коррагенана и поливинилового спирта (CRG-PVA). Данный гидрогель синтезируется путем многократных циклов замораживания/оттаивания без использования сшивающих агентов. Гидрогель может набухать в растворах, содержащих косметические или фармацевтические субстанции и выдавать их по мере отдачи влаги, без разрушения самого гидрогеля. Такой способ отдачи веществ в системе CRG-PVA нельзя регулировать путем изменения числа циклов замораживания/оттаивания в процессе синтеза.

В данной работе было изучении влияние наночастиц диоксидов алюминия и циркония на такие свойства гидрогеля CRG-PVA как набухаемость, влагоотдача, а так же на прочностные свойства. В ходе работы были синтезированы гидрогели, и изучена их набухаемость и влагоотдача. Проведены рентгено-струткурные исследования полученных образцов композитных гидрогелей. Показано что с помощью подбора интертных недорогих наночастиц можно регулировать указанные свойства гидрогелей, что позволяет использовать данный подход к созданию гидрогелей на основе CRG-PVA с заданными свойствами.

T. Vermonden, R. Censi and W. E. Hennink, Chem. Rev., 2012, **112**, 2853−2888.

Y. Li, D. Maciel, J. Rodrigues, X. Shi and H. Tomás, Chem. Rev., 2015, **115**, 8564–8608.

K. Zhao, L. Feng, H. Lin, Y. Fu, B. Lin, W. Cui, S. Li and J. Wei, Catalysis Today, 2014, **236**, 127–134.

S. Merino, C. Martı´n, K. Kostarelos, M. Prato and E. Va´zquez, ACS Nano, 2015, **9**, 4686-97.

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ И СТРУКТУРЫ ВОЛОКОН ПЕПТИДА RADA-16-I

Багров Д.В.[1,2], Газизова Ю.С.[2], Подгорский В.В.[2], Удовиченко И.П.[3], Данилкович А.В.[3], Прусаков К.А.[2], Клинов Д.В.[2]

[1] Биологический факультет МГУ

[2] ФГБУ ФНКЦ ФХМ ФМБА

[3] Филиал института биоорганической химии им. М.М.Шемякина и Ю.А.Овчинникова

e-mail: dbagrov@gmail.com

Пептид RADA-16-I за счет регулярной структуры способен формировать нанофибриллы и гидрогели. RADA-16-I является перспективным биосовместимым материалом для тканевой инженерии: он биодеградируемый, не иммуногенный, хорошо стимулирует адгезию клеток. Несмотря на значительный прогресс в изучении биомедицинских свойств RADA-16-I, структура его нанофибрилл описана сравнительно слабо. В частности, существует гипотеза о возможности существования монослоев RADA-16-I в растворе [1,2].

В данной работе нанофибриллы RADA-16-I были изучены методами атомно-силовой и просвечивающей электронной микроскопии, а также с помощью ЯМР-спектроскопии [3]. Обнаружено, что нанофибриллы RADA-16 имеют дискретные значения толщины с шагом ~1,8 нм, и состоят из молекулярных бислоев. Для сравнения, у пептида RLDL-16-I, в котором аланин заменены на лейцин, толщина бислоя увеличивается до 2,4 нм. Полученные значения отлично подтверждаются данными молекулярно-динамического моделирования.

Нами впервые экспериментально показано, что пептид RADA-16-I способен формировать не только бислойные, но и монослойные структуры, т.е. ленты. Они формируются не в растворе, а на поверхности подложки (слюды) при сорбции пептида из раствора в кислой среде.

[1] Z. Ye, H. Zhang, H. Luo et. al. // Journal of Peptide Science, 2008, vol. 14, № 2, p. 152–62

[2] H. Yokoi, T. Kinoshita, S. Zhang // PNAS, 2005, vol. 102, № 24, p. 8414–9

[3] Bagrov D.V., Gazizova Y.S. et. al. // Biopolymers: Peptide science, 2016, 106, №1, p. 72-81.

ТРЕХМЕРНАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ РИБОСОМ В СОСТАВЕ ПОЛИРИБОСОМ МЕТОДАМИ КРИО-ЭЛЕКТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Баймухаметов Т.Н.[1], Афонина Ж.А.[2], Печникова Е.В.[3], Сорокин И.И.[2], Широков В.А.[2], Ковальчук М.В.[1,3], Ильин В.А.[1], Васильев А.Л.[1,3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Институт белка РАН

[3] Институт кристаллографии РАН

e-mail: baymukhametov.timur@gmail.com

Полирибосомы (полисомы) представляют собой упорядоченные структурно-функциональные комплексы отдельных рибосом, одновременно транслирующих одну молекулу мРНК. Высоконагруженные эукариотические полисомы, как правило, представлены двурядными структурами, среди которых выделяют две основные топологии организации: циркулярную и линейную. Для понимания процессов трансляции, а также механизмов, определяющих структурную организацию полисом, необходима информация о в взаимных расположениях и ориентациях рибосом, составляющих комплекс.

Современная крио-электронная томография (крио-ЭТ) является мощным методом структурных биологических исследований и позволяет достичь разрешения, достаточного для однозначного определения ориентаций отдельных рибосом в составе полисомы. В данной работе, на примере образцов, полученных в Институте белка РАН, будет описана методология томографических исследований в просвечивающей крио-электронной микроскопии с использованием современного оборудования Titan Krios (FEI, США) и вычислительные методы, лежащие в основе томографической реконструкции и субтомографического усреднения. Результаты работы свидетельствуют о потенциальной возможности решения задачи взаимосвязи особенностей структурной топологии полисом и их активности.

Работа выполнялась при поддержке грантов РФФИ 15-04-08649 и 16-34-60148, и Программы Президиума РАН «Молекулярная и клеточная биология».

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕЦИФИЧНОСТИ БАКТЕРИАЛЬНЫХ НУКЛЕОЗИДФОСФОРИЛАЗ NP-II СЕМЕЙСТВА

Балаев В.В., Лашков А.А., Прокофьев И.И., Габдулхаков А.Г., Михайлов А.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: vlad_balaev@mail.ru

Пиримидинфосфорилазы широко используются в качестве биокатализаторов для синтеза нуклеозидов в фармакологии и биотехнологической промышленности, что предполагает знание структурных особенностей их функционирования.

Методом рентгеноструктурного анализа с использованием источника синхротронного излучения BESSY II (Берлин, Германия) определены и депонированы в RCSB PDB пространственные структуры тимидин-специфичной пиримидинфосфорилазы из *Salmonella typhimurium* (***St*TP**): с сульфат-анионом (**SO4**) (1.91 Å, PDB ID 5EY3), с тимидином (**THM**)(2.55 Å,4YEK), уридином (**URI**)(2.6 Å, 4YYY); широко-специфичной пиримидинфосфорилазы из *Bacillus subtilis* (*Bs*PyNP) с SO4 (2.66 Å, 5EP8).

Выявлена структурная основа узкой субстратной специфичности *St*TP к тимидину. В комплексе *St*TP+URI боковая группа Leu117 повернута на 180° в следствии clash-контакта с 2'-гидроксигруппой URI, в отличие от THM. В результате чего, 2'-OH URI образует водородные связи с кислородом основной цепи Leu117 и молекула уридина переходит в неактивную конформацию, в отличие от THM.

При сравнении структур комплексов *St*TP и *Bs*PyNP обнаружено, что в *Bs*PyNP с фосфат-анионом контактирует Lys108 (Met111 в *St*TP). Это приводит к различию в электрических зарядах кислорода OH-группы фосфат-аниона в активном центре *St*TP и *Bs*PyNP и сказывается на субстратной специфичности этих ферментов.

Проведен виртуальный скрининг соединений - ингибиторов *Bs*PyNP не способных связаться с *St*TP. В последующем вычислительном МД-эксперименте этим условиям отвечало лишь одно соединение: 2-пиримидин-2-ил-1H-имидазол-4-карбоновая кислота.

Работа выполнена за счет средств бюджетного финансирования ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-04-00952 а) и гранта Президента РФ (МК-9246.2016.3).

МЕТОДИКА IN SITU ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ БЕЛКОВЫХ СТРУКТУР

Благов А.Е., Бойкова А.С., Волковский Ю.А., Дьякова Ю.А., Ильина К.Б., Марченкова М.А., Писаревский Ю.В., Просеков П.А., Ковальчук М.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: boykova.irk@yandex.ru

Гибридные наносистемы, включающие в себя в качестве функциональных элементов белки и белковые пленки, могут являться базисом для создания принципиально новых устройств молекулярной электроники [1]. В то же время исследование процессов роста и деградации кристаллов белков может оказаться важным шагом на пути в установлении условий, влияющих на свойства и структуру гибридной системы. Для in situ исследования кристаллов белков и белковых пленок была сконструирована кристаллизационная измерительная ячейка, позволяющая сохранять их в нативном состоянии [2]. Ячейка состоит из корпуса и чаши, фиксированной на основании. Верхняя часть корпуса представляет окно из оптически прозрачного и слабопоглощающего в рентгеновском диапазоне материала, что обеспечивает возможность проводить исследования оптическими и рентгеновскими методами

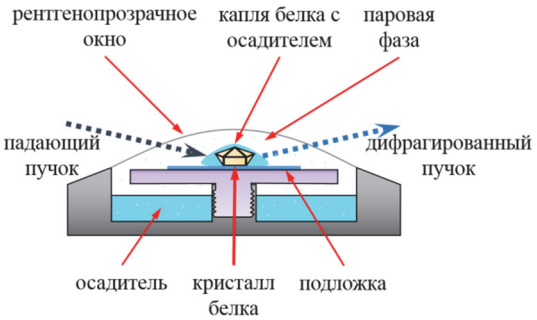


Рис.1. Схематическое изображение разработанной герметичной кристаллизационной ячейки.

Были проведены исследования кристалла модельного белка лизоцима и пленок лизоцима методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и рентгеновской рефлектометрии. Измерения проводились на протяжении всего цикла жизни кристаллов, вплоть до деградации и их разрушения. Были зарегистрированы изменения ширины и амплитуды КДО в процессе роста кристаллов, соответствующие изменению степени совершенства кристаллов. Также методом рентгеновской рефлетометрии были изучены пленки белка лизоцима, полученные методом Ленгмюра-Шеффера на кремниевой подложке. Было показано наличие на твердой подложке упорядоченной структуры белковой пленки.

Ron I., Pecht I., Sheves M., Cahen D.//Acc Chem Res.,2010. Vol. 43. No 7.pp. 945-53.

M. V. Kovalchuk, at el., Crystallography Reports, 2014, Vol. 59, No. 5, pp. 679–684.

ТРЁХМЕРНАЯ СТРУКТУРА ХАРПИНО-ПОДОБНОГО АНТИМИКРОБНОГО ПЕПТИДА

Бозин Т.Н.[1], Щукина В.Д.[2], Бочаров Э.В.[1,2], Рогожин Е.А.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] ФГБУ науки «Институт биоорганической химии имени академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН»
e-mail: timur.bozin@gmail.com

Пространственная структура антимикробного пептида – нигеллина-1.1 (nigellin-1.1), выделенного из семян черного тмина (Nigella sativa L.), определена методом ЯМР-спектроскопии с использованием уникального оборудования Ресурсного центра молекулярной и клеточной биологии Курчатовского комплекса НБИКС-технологий. Для последовательного отнесения 1H-, 13C-резонансов и кросс-пиков ЯЭО были накоплены двумерные 1H/1H-ЯМР спектры DQF-COSY, TOCSY и NOESY, а также гетероядерный спектр 1H/13C-HSQC (накопленный на природном содержании изотопа 13C). Расчет пространственной структуры выполнялся методом молекулярной динамики в пространстве торсионных углов с использованием алгоритма “моделируемого отжига” (simulated annealing). Конформация полипептида нигеллина-1.1 включает две взаимодействующие друг с другом α-спирали Arg2-Cys14 (с витком 310-спирали Thr15-Ile17 на С-конце) и Tyr20-Thr36 (с N-“кэп” водородной связью между боковой и основной цепью остатков Asp19-Gly22). Остаток Pro18 из короткой петли, соединяющей α-спирали, находится trans конфигурации. Таким образом, пептид нигеллин-1.1 имеет вид левозакрученной шпильки с углом между антипараллельными α-спиралями ~160°, которая стабилизирована тремя дисульфидными связями Cys6-Cys34, Cys10-Cys30 и Cys14-Cys26. При этом, распределение полярных и гидрофобных остатков в шпильке неравномерно, в результате ее поверхность амфифильна, что указывает на возможную мембранную активность нигеллина-1.1, а общая конформационная гомология указывает на его принадлежность к семейству α-харпининов, или харпино-подобных пептидов, в виде отдельной так называемой «структурной ветви» с тремя дисульфидными мостиками.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-04-05097-а.

ИЗУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЕТОК ДРОЖЖЕЙ ПО ГРАНУЛЕ ДЛЯ ПРОТОЧНОГО ФЕРМЕНТЕРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ

Борголов А.В., Сенин Р.А., Готовцев П.М., Конова И.А., Сергеева Я.Э., Горин К.В., Василов Р.Г.
НИЦ Курчатовский институт
e-mail: borgoloff@gmail.com

На сегодняшний день для промышленного применения используются ферменты, иммобилизованные на каком-либо носителе [1]. Однако в настоящее время рассматривается применение аналогичных носителей и для иммобилизации клеток, как для процессов биосинтеза, так и для систем с клеточными катализаторами [2]. Следует отметить, что в данном случае речь идет об иммобилизации сложной системы, которая взаимодействует с окружающей средой посредством различных процессов. В случае биосинтеза, иммобилизация клеток может дать ряд преимуществ, включая возможность создания проточных систем с циркуляцией субстрата [3]. В данной работе решается задача изучения распределения биомассы иммобилизованных в грануле дрожжей, предназначенной для проточного ферментера.

Для визуализации пространственного распределения использовалась рентгеновская микротомография на синхротронном источнике. Данная методика – развитие известной компьютерной томографии для исследования объектов с высоким пространственным разрешением на синхротронном источнике. Суть методики заключается в получении серии последовательных теневых проекций объекта в различных направлениях, и реконструкции внутренней структуры по собранной совокупности данных.

Измерения проекций были выполнены на станции РТ-МТ Курчатовского источника синхротронного излучения [4]. В рамках работ была разработана методика окраски клеток дрожжей с использованием раствора йода в додеканоле.

Полученные результаты не только показывают распределение биомассы в конкретных образцах гранул, но и позволяют использовать разработанные подходы для исследования различных аналогичных объектов в промышленной биотехнологии.

A. Hollaender, A. Laskin, and P. Rogers (ed.), Basic biology of new developments in biotechnology, p. 465-496. Plenum Press, New York. (1983)

P.J. Verbelen, D.P. De Schutter, et al. Biotechnol Lett (2006) 28:1515–1525

J.M. Guisan ed. Methods in biotechnology (2006) 22

Сенин Р.А., Хлебников А.С., и др. Кристаллография. 2013. Т. 58. № 3. С. 510.

СТРУКТУРА ФЛУОРЕСЦЕИН-5-ИЗОТИОЦИАНАТ ФИТЦ МЕЧЕННОГО ЛИЗОЦИМА С РАЗРЕШЕНИЕМ 1.15А

Власкина А.В., Симановская А.А., Попов А.Н.,
Крюкова М.В., Качалова Г.С.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: anna.eltsina@gmail.com

В современных протеомных проектах, а также для разработки лекарственных препаратов, биокатализаторов, чрезвычайно востребовано определение структур белковых молекул методом рентгеноструктурного анализа. Применение данного метода критическим образом зависит от возможности кристаллизации исследуемого объекта. Для возможности визуальных наблюдений за изменениями гомогенности распределения кристаллизуемого белка во всем объеме кристаллизационной капли без нарушения ее целостности была поставлена задача использовать в качестве объекта исследования лизоцим, ковалентно связанный с FITC флуорофором. Был разработан оригинальный протокол для получения 99% очищенного продукта Lysozyme-FITC, в котором одна молекула флуорофора ковалентно связана с одной молекулой белка. Соотношение FITC/лизоцим определяли по поглощению FITC при 450нм и разности поглощения лизоцима и FITC на длине волны 275 нм. Для продуктов были получены следующие значения: [FITC]= 37.5*10-4 моль/л; [Lysozyme]= 37.8*10-4 моль/л, что соотвествовало отношению 0.99. Был проведена кристаллизация Lysozyme-FITC с концентрацией 5мг/мл с использованием стандартных растворов кристаллизационных наборов компании Hampton Research. Набор дифракционных данных был отснят на станции ID23-1 (ESRF, Гренобль) с разрешением 1.15 Å. Кристаллы принадлежат пространственной группе P43212 с параметрами ячейки a=b=80.76Å, c=36.56Å. Структура была решена методом молекулярного замещения с использованием в качестве исходной модели структуры лизоцима (4NGJ). Уточнение проведено с помощью программы REFMAC до R-fact=0.15 (R-fact free=0.18). Впервые полученная структура белка с молекулой FITC представляет несомненный интерес для выявления механизма образования ковалентной связи N-H2 группой лизина белка и флуорофора.

ПОТЕНЦИАЛЗАВИСИМЫЕ КАЛИЕВЫЕ КАНАЛЫ KV10.2: ЭКСПРЕССИЯ И СТРУКТУРА

Глухов Г.С.[1], Кудряшова К.С.[2], Новоселецкий В.Н.[1],
Соколова О.С.[1]
[1]Биологический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова
[2] Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова
e-mail: gluhovg@gmail.com

Потенциалзависимые калиевые каналы (Kv) подразделяются на несколько подсемейств и широко распространены в центральной нервной эндокринной системах, сердце, легких, а также других тканях организма. Подсемейство Kv10.2 характеризуется длинными внутриклеточными N- и C-концевыми аминокислотными последовательностями, которые формируют ряд структурных доменов. N-концевой домен (PAS) канала Kv10.2 играет важную роль в активации канала, возможно он способен изменять скорость дезактивации канала путем связывания непосредственно с линкером S4-S5, расположенном во внутреннем устье поры канала, или с участками вблизи данного региона. Нарушения в экспрессии канала приводят к развитию синдрома LQT. Сверхэкспрессия канала Kv10.2 в тканях связана с процессами возникновения и развития опухоли. Присутствие Kv10.2 в опухолевых клетках делает его потенциальным диагностическим маркером.

В данном исследовании при помощи электронной микроскопии единичных молекул мы получили трехмерную структуру человеческого канала Kv10.2 с удаленным цитоплазматическим доменом (Kv10.2ΔPAS). Белок канала экспрессировали в клетках COS7 и очищали с помощью аффинной хроматографии. В ходе иммунофлюоресцентного исследования было обнаружено, что удаление домена PAS нарушает распределение канала Kv10.2ΔPAS на поверхности клетки. Для интерпретации трехмерной структуры мы использовали моделирование по гомологии. Сравнение трехмерных структур полноразмерного и транкированного каналов Kv10.2 позволило определить расположение цитоплазматических доменов в полноразмерном канале, а также возможные пути регулирования канала.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации. Уникальный идентификатор проекта - RFMEEI61615X0044.

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ КЛЕТОЧНОЙ СТЕНКИ МИКРОВОДОРОСЛЕЙ И ДРОЖЖЕЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРИСУТСТВИИ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ТИТАНА

Горин К.В.[1], Демина П.А.[2], Готовцев П.М.[1], Сергеева Я.Э.[1], Кузьмичева Г.М.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Московский технологичесикий университет, МИТХТ

e-mail: gkvbio@gmail.com

В настоящее время производство моторного биотоплива из микроорганизмов становится серьезным сегментом промышленности [1]. Основным веществом, которое выделяется из микроорганизмов для получения биотоплива, являются липиды [1]. Для их получения требуется собрать биомассу из культуральной среды, сконцентрировать, разрушить и выделить с помощью экстрагирующих агентов (например, метанол и хлороформ). Альтернатива вышесказанному - использование неорганических наночастиц, которые под воздействием УФ-света способствуют разложению находящихся в растворе неорганических соединений [2].

Результаты изучения разложения клеток микроводорослей (штамм Chlorella vulgaris GKV1) и дрожжей (Yarrowia lipolytica W29) в присутствии наноразмерного TiO2 (Degussa P25: анатаз~85% + рутил ~15% с размерами кристаллитов 19 нм и 25 нм и удельной поверхностью 53 м2 /г) под действием УФ-излучения (ртутная лампа iSOLde CLEO Compact 15W, λ = 400 нм) показали, что клеточная стенка микроводорослей разрушается (метод оптической микроскопии) в течение 4 час; тот же результат для клеточной стенки дрожжей достигнут за 6 час при соотношении «культуральная среда: водная суспензия наночастиц TiO2» =1:2 с концентрацией TiO2 10 мг/мл и 15 мг/мл для микроводорослей и дрожжей. Всплывшая маслянистая пленка собиралась и анализировалась методом тонкослойной хроматографии, результаты которого свидетельствует о присутствии в ней, в основном, липидов, что в перспективе исключает ряд стадий в технологической линии по производству биотоплив.

[1] Chiaramonti D., Prussi M. et. al. // Appl. Energy, 2014, vol. 136, pp. 767–774.

[2] Shwetharani R., Balakrishna R.G. // Appl. Energy, 2016, vol. 168, pp. 364–374.

ФОРМИРОВАНИЕ КАНАЛА В ВОДОНАСЫЩЕННЫХ СРЕДАХ ИМПУЛЬСАМИ ИАГ:Er ЛАЗЕРА

Дмитриев А.К., Коновалов А.Н., Кортунов В.Н., Ульянов В.А.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: dmitriev_a62@mail.ru

Процедура лазерной реваскуляризации, в результате которой в ткани формируются глубокие лазерные каналы, инициирует процессы неоангиогенеза и восстановление кровоснабжения ишемизированных тканей. Для этих целей, благодаря высоким значениям поглощения излучения в водонасыщенных мягких тканях, могут быть использованы мощные импульсные ИАГ:Er лазеры с генерацией на длине волны 2,94 мкм.

В докладе рассмотрены особенности перфорации биомоделей на основе желатина и мышечной ткани импульсами ИАГ:Er лазера (с энергией в импульсе до 8 Дж). Исследованы характеристики ударно-волнового воздействий на стенки лазерного канала. С помощью скоростной видеосъемки исследована динамика формирования лазерного канала и измерены скорости его распространения в воде и желатиновых моделях. Показано, что эффективный рост лазерного канала осуществляется за счет высокого давления паров на стенки и дно канала.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЙ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ 17В-ГИДРОКСИСТЕРОИДДЕГИДРОГЕНАЗЫ МЫШИ

Дубова К.М.[1,2], Самыгина В.Р.[1,2,] Карпов М.В.[3], Николаева В.М.[3], Стрижов Н.И.[3]
[1] Институт Кристаллографии ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН
[2]НИЦ «Курчатовский Институт»
[3]Институт биохимии и физиологии микроорганизмов им. Г.К. Скрябина РАН
e-mail: kira-d91@mail.ru

17β-гидроксистероиддегидрогеназы (17β-ГСД) играют ключевую роль в регуляции биологической активности андрогенов и эстрогенов. 17β-ГСД мыши принадлежит к семейству альдокеторедуктаз и катализирует обратимое превращение андростендиона в тестестерон. Несмотря на высокую гомологичность белков этого семейства, они отличаются активностью и субстратной специфичностью. Детальный рентгеноструктурный анализ (РСА) позволяет определить ньюансы механизма катализа и найти путь модификации функции белков. Синтетическая кДНК 17β-ГСД5 мыши была экспрессирована в E.coli. Фермент был очищен до гомогенного состояния методом IMAC афинной хроматографии с последующим отщеплением His-тагов с помощью тромбина и TEV протеазы. Была проведена кристаллизация двух различных генноинженерных конструкций методом диффузии в парах с использованием полиэтиленгликолей различного молекулярного веса. Кристаллы апоформы белка и комплекса с НАДФ в виде пластин и плоских призм вырастали в течение 3-4 недель до 0.1-0.2мм. По результатам предварительного тестирования дифракционного качества с использованием синхротронного излучения кристаллы принадлежат к моноклинной сингонии. Кристаллы характеризовались структурной неоднородностью и сильной анизотропией, дифрагировали от 3 до 1.5Å в разных направлениях, данные в процессе обработки. В результате оптимизации условий кристаллизации с целью улучшения дифракционного качества выращены изометричные кристаллы апоформы фермента, пригодные для РСА. Работа выполнена частично при поддержке Федерального Космического Агентства (рентгеноструктурные исследования) и гранта РНФ № 14-24-00169 (экспрессия, выделение и очистка белка).

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНКУРЕНТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА, ФНР И ГИДРОГЕНАЗЫ

Дьяконова А.Н., Хрущев С.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.
МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail: alex.diakonova@gmail.com

Производство биоводорода является важной биотехнологической задачей. Некоторые фотосинтезирующие организмы содержат фермент гидрогеназу, восстанавливающую протоны до водорода. Гидрогеназа получает электроны от белка ферредоксина – акцептора электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Ферредоксин также взаимодействует с другими белками, в первую очередь с ферредоксин-НАДФ+-редуктазой, восстанавливающей НАДФ+ для цикла Кальвина. Мы исследовали процесс переключения электронного потока ферредоксина между ФНР и гидрогеназой в зависимости от условий среды.

Мы использовали метод прямого многочастичного моделирования: в методе отдельные молекулы движутся за счет броуновской силы и электростатических сил, создаваемых соседними молекулами и растворителем. Используя трехмерные структуры белков, полученные методами рентгеновской дифракции, мы создали три модели взаимодействия белков: парные модели образования комплексов Фд-ФНР и Фд-гидрогеназа и тройную модель конкуренции ФНР и гидрогеназы за ферредоксин.

pH стромы хлоропластов в темноте составляет около 6, а на свету увеличивается до 8-8,5, и данный процесс может влиять на взаимодействие белков друг с другом. На модели мы показали, что константа скорости взаимодействия ферредоксина и ФНР постоянна в широком диапазоне pH. Мы предполагаем, что активность ФНР не регулируется изменением pH в строме. Однако, константа скорости образования комплекса Фд-гидрогеназа значительно зависит от pH: в границах 7-9 единиц pH она возрастает в три раза. Поскольку гидрогеназа восстанавливает протоны, ее активность должна быть выше при кислом pH. По-видимому, регуляция сродства гидрогеназы к ее реакционным партнерам (H+ и Фд) осуществляется засчет изменения ее электростатических свойств: в темноте она неактивна, а на свету активируется и взаимодействует с Фд и H+.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ПУРИННУКЛЕОЗИДФОСФОРИЛАЗЫ ИЗ E. COLI С АЦИКЛОВИРОМ

Жухлистова Н.Е.[1], Тимофеев В.И.[1,2], Абрамчик Ю.А.[3], Муравьева Т.И.[3], Есипов Р.С.[3], Куранова И.П.[1,2]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*НИЦ «Курчатовский институт»*

[3]*Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН*

Интерес к изучению пуриннуклеозидфосфорилаз (ПНФ), катализирующих обратимую реакцию фосфоролиза нуклеозидов, обусловлен их важной ролью в метаболизме нуклеотидов. ПНФ находят применение в химико-ферментативном синтезе аналогов природных нуклеозидов, многие из которых обладают противовирусным и противоопухолевым действием. В настоящей работе представлена пространственная структура комплекса ПНФ из E. coli с противовирусным препаратом ацикловиром (N9-ациклогуанозином), аналогом субстрата 2'-дезоксигуанозина. Кристаллы комплекса E. coli ПНФ/ацикловир для рентгеноструктурного анализа получены методом встречной диффузии в капиллярах в условиях микрогравитации. Молекула ацикловира с равной вероятностью локализуется в нуклеозидсвязывающем сайте в двух положениях и стабилизируется гидрофобными взаимодействиями и водородными связями. Выявлены конформационные изменения аминокислотных остатков при связывании ацикловира. Проведено сравнение комплекса E. coli ПНФ/ацикловир с известными ранее комплексами ПНФ, выделенными из разных источников. В комплексе ПНФ из B. subtilis с 2'-деоксигуанозином, ациклическим аналогом которого является ацикловир, и комплексе E. coli ПНФ/ацикловир гуаниновое основание в активном центре связано одинаково. Ациклические фрагменты двух равновероятных положений ацикловира локализуются там же, где рибозный фрагмент молекулы 2'-дезоксигуанозина. Сравнение кристаллических комплексов ПНФ/N9-ациклогуанозин (ацикловир) из E. coli и ПНФ/N7-ациклогуанозин из селезенки теленка, показало, что пуриновые основания ациклогуанозиновых ингибиторов находятся в инвертированных по отношению друг к другу положениях.

Работа выполнена при поддержке ЦНИИМаш Роскосмоса.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ТРОЙНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ И ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ МЕТОДОМ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Загоскин Ю.Д., Григорьев Т.Е., Бакиров А.В.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: zagos@inbox.ru

В последние десятилетия наблюдается повышенный интерес к применению биоразлагаемых материалов в медицине. Гидрогели – полимерные сетки, которые могут обратимо набухать в водной среде. Они могут быть использованы как в качестве средств доставки лекарств, так и в качестве клеточного субстрата. Перспективными являются гели на основе сополимеров полилактида, содержащие гидрофильные блоки. В зависимости от типа лактидных блоков (L-лактид или D,L-лактид), длины и количества обоих блоков, а также от способа получения, структура гидрогелей и их свойства могут варьироваться. Для лучшего понимания данных зависимостей и возможности «настраивать» поведение данных материалов в различных условиях необходимо исследовать процесс структурообразования в растворах.

В настоящей работе был синтезирован ряд тройных блок-сополимеров молочной кислоты и этиленгликоля различного состава. Были разработаны методики получения гидрогелей на основе синтезированных блок-сополимеров. Полученные гидрогели были исследованы методом рассеяния рентгеновских лучей. Из полученных данных было установлено, что отношение длин блоков сильно влияет на процесс структурообразования в растворе. При соотношении 1:3 и 5:1 (ПЛА:ПЭГ) не наблюдаются какая-либо упаковка, в то время как при соотношении 1:2 и 3:2 (ПЛА:ПЭГ) наблюдается упаковка с характерным периодом приблизительно 10 нм.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ №15- 33- 20986

РЕКОНСТРУКЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ЯДРА ФИКОБИЛИСОМЫ

Зленко Д.В.,[1,2] Галочкина Т.В.,[1] Красильников П.М.,[1,2] Стадничук И.Н.[2]

[1] *Биологический ф-т МГУ имени М.В. Ломоносова*

[2] *Институт Физиологии Растений имени А.К. Тимирязева РАН*

e-mail: dvzlenko@gmail.com

Фикобилисома (ФБС) является мультисубъединичной, водорастворимой светособирающей антенной цианобактерий и красных водорослей. ФБС состоит из ядра, сложенного тремя плотно упакованными цилиндрами, каждый из которых состоит из четырёх дисковидных тримеров гетеродимеров аллофикоцианина (АФЦ), и шести боковых цилиндров, расходящихся в стороны от ядра и состоящих из нескольких гексамеров гетеродимеров фикоцианина и фикоэритрина. Точная молекулярная структура ФБС неизвестна [1].

Анализируя структуру кристаллов АФЦ, мы обнаружили элементы укладки тримеров, соответствующие как латеральным контактам между цилиндрами [2], так и контактам между выпуклыми [2] и вогнутыми [3] поверхностями тримеров АФЦ, соответствующим укладке тримеров в цилиндры ядра. Совмещая эти элементы структуры ФБС нам удалось восстановить структуру ядра, которая хорошо соответствует электронно-микроскопическим наблюдениям (рис). В представленной модели ядра ФБС (рис) молекулы АФЦ не пересекаются друг с другом, а все контакты между ними соответствуют кристаллам [2,3].

Построенная модель является единственной молекулярной моделью ядра ФБС [5], позволяющей делать количественные оценки скоростей миграции энергии, а также строить модели взаимодействия ФБС с другими элементами фотосинтетического аппарата.

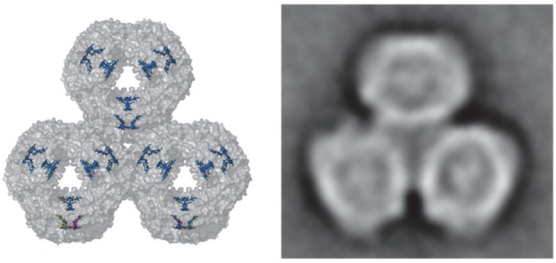


Рис. Молекулярная модель (слева) и электронная микрофотография (справа, [4]) ядра ФБС.

[1] M. Watanabe, M. Ikeuchi // Photosynth. Res., 2013, v. 116, no. 2, p. 265 – 276.

[2] K. Brejc et al. // J. Mol. Biol., 1995, v. 249, no. 2, p. 424 – 440.

[3] J.Y. Liu et al. // J. Biol. Chem., 1999, v. 274, no. 2, p. 16 945 – 16 952.

[4] A.A. Arteni et al. // BBA, 2009, v. 1787, no. 4, p. 272 – 279.

[5] D.V. Zlenko et al. // Photosynth. Res. 2016. DOI: 10.1007/s11120-016-0264-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ЛИЗОЦИМА ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ.

Ильина К.Б.[1,2], Благов А.Е.[1,2], Бойкова А.С.[1,2], Дьякова Ю.А.[1,2], Конарев П.В.[1,2], Крюкова А.Е.[1,2], Куклин А.И.[3], Марченкова М.А.[1,2], Писаревский Ю.В.[1,2], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*

[3] *Объединенный институт ядерных исследований*

e-mail: ilina-ks@mail.ru

Работа посвящена исследованию состояния раствора лизоцима (HEWL) в процессе кристаллизации. Ранее были проведены исследования начальной стадии кристаллизации лизоцима методом малоуглового рентгеновского рассеяния [1,2]. Было показано, что при кристаллизации лизоцима тетрагональной сингонии в растворе образуются димеры и октамеры. Сделано предположение о том, что минимальными единицами роста тетрагонального лизоцима являются октамеры. Также был предложен новый подход к определению единицы роста кристаллов тетрагонального лизоцима основанный на анализе кристаллической структуры. [2]

В данной работе процесс кристаллизации лизоцима тетрагональной сингонии исследовали методом малоуглового рассеяния нейтронов. Особенностью этой работы было исследование кристаллизационных растворов в тяжелой воде (D_2O), а также выбор более широкого диапазона условий кристаллизации. В работе было подтверждено, что при кристаллизации лизоцима в D_2O тетрагональной сингонии образуется достаточное количество октамеров. При понижении температуры и увеличении концентрации белка до оптимальных значений количество октамеров растет (рис. 1.).

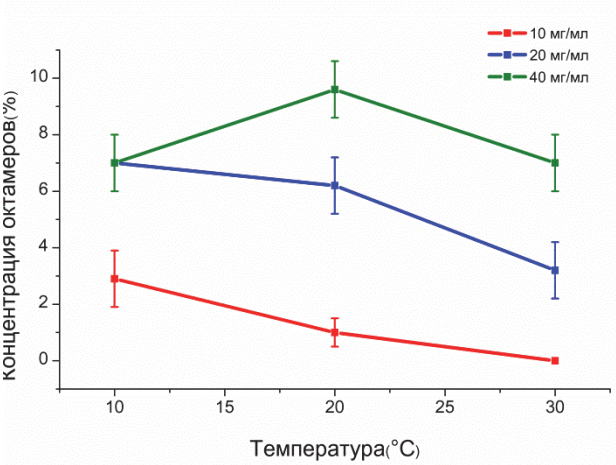


Рис.1. Содержание октамеров в растворе белка с разной концентрацией белка с осадителем в условиях кристаллизации лизоцима тетрагональной сингонии при изменении температуры (зеленая- $C_{лиз}$=40 мг/мл, синяя- $C_{лиз}$=20 мг/мл, красная- $C_{лиз}$=10 мг/мл).

[1] Марченкова М.А., Волков В.В., Благов А.Е. и др. // Кристаллография, 2016, том 61, № 1, с. 14–19

[2] Kovalchuk M.V., Blagov A.E., Dyakova Yu.A. et. al.// Cryst. Growth Des., 2016, V. 16, p. 1792−1797.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОРИСТЫХ ЧАСТИЦ CACO3, МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ AG, МЕТОДАМИ РЭМ, П(Р)ЭМ, ВКЛЮЧАЯ ЭЛЕКТРОННУЮ ТОМОГРАФИЮ

Камышинский Р.А.[1,2], Михуткин А.А.[2], Чесноков Ю.М.[2], Марченко И.В.[2,3], Парахонский Б.В.[3,4], Букреева Т.В.[2,3], Васильев А.Л.[2, 3]

[1] МФТИ (ГУ)

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова РАН

[4] СГУ имени Н.Г. Чернышевского

e-mail: terra.tartarara@gmail.com

Сенсорная платформа для биологических систем предполагает использование биосовместимых пористых неорганических частиц, модифицированных биополиэлектролитами и наночастицами Ag, что позволяет получить гигантское комбинационное рассеяние (ГКР) света от одиночных молекул и создать биосенсор. Прохождение разработанных систем через клеточную мембрану и их проникновение в клетку обеспечит возможность исследования внутриклеточных процессов, включая изучение метаболизма в условиях различных внешних воздействий.

Различными методами электронной микроскопии - растровой (РЭМ), просвечивающей (ПЭМ) и просвечивающей растровой (ПРЭМ), исследована микроструктура сферических и эллиптических пористых частиц CaCO3, модифицированных наночастицами Ag. Установлено, что размеры CaCO3 - носителей лежат в пределах 0,9-3,7 мкм. Наночастицы Ag округлые, со средним размером 30 нм и наименьшей концентрацией в центре образца.

Для более детального изучения распределения наночастиц Ag в носителе применялся метод электронной томографии. Трехмерная модель исследуемого объекта, восстановленная после обработки серии изображений, полученных под различными углами в ПРЭМ, позволила визуализировать картину пространственного распределения наночастиц (рис.1). Сегментирование наночастиц Ag дало возможность получить численные характеристики их морфологии, пространственного и размерного распределений.

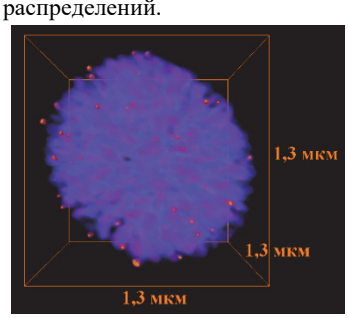


Рис.1. Трехмерная визуализация CaCO3-носителей с наночастицами Ag.

[1] Lyubutin I.S., Starchikov S.S., Bukreeva T.V., et al. // Materials Science and Engineering C. 2014. V. 45. P. 225-233.

ДИАГНОСТИКА ВЛИЯНИЯ ЭКЗОГЕННОГО ФАКТОРА НА ФОРМИРОВАНИЕ БИОМИНЕРАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТКАНЕЙ ЗУБОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Киселева Т.Ю[1]., Короленкова М.В[2]., Старикова Н.В[2]., Майоров М.И.[1], Кобзев А.А.[1], Новакова А.А.[1], Илюшин А.С.[1]

[1] МГУ им. М.В.Ломоносова, Физический факультет

[2] Научно-исследовательский институт стоматологии и челюстно-лицевой хирургии, Клиника детской стоматологии и ЧЛХ, Минздрава РФ

e-mail: Kiseleva.TYu@gmail.com, *Rapuncel1@mail.ru*

Междисциплинарные исследования на стыке экспериментальной физики, химии, биологии и медицины, связанные с применением современных физических методов к практическим задачам диагностики и лечения относятся к числу наиболее востребованных. Применение физических методов исследования, таких как рентгеновская дифракция, электронная микроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния к анализу тканей человеческого организма позволяет провести инструментальную аттестацию их морфологических и структурных единиц, выявить аномальные и патологические проявления в структуре, важные для профилактики, а также тканесохраняющих мероприятий.

В настоящее время все больше и больше стоматологических клиник, включая педиатрические, имеют дело с пациентами, которые перенесли, переносят или будут переносить специальное противоонкологическое лечение в будущем. Известно, что общим принципом действия химиотерапевтических противоопухолевых препаратов- мощного экзогенного фактора- является воздействие на патологические клетки организма, препятствие их делению, оказывая наиболее сильное воздействие на быстро и постоянно растущие ткани. Такое воздействие существенно и на клетки, отвечающие за процессы минерализации костной ткани, в частности, твердых тканей зубов. Это влечет за собой возникновение аномалий их развития, особенно в ранний период. При воздействии на организм повреждающих факторов развитие зубов нарушается, приводя к некариозному поражению твердых тканей, причем в зависимости от этапа формирования, эти нарушения носят разный характер [1].

Клинические характеристики изменений твердых тканей под действием противоопухолевой терапии, стоматологические осложнения в период реабилитации и их корректировка у детей остаются малоизученными. В настоящее время оценка структурного состояния зубов осуществляется клинически по внешнему виду, твердости тканей, окрашиванию специальными препаратами, а также методом рентгенографии. Аномально сформированные зубы имеют неэстетический внешний вид, форму, влияют на неправильное формирование челюстей и быстро разрушаются. Часть из них удаляется по ортодонтическим показаниям, что позволяет сохранять их для последующего аналитического исследования.

Для развития методов сохранения функциональности аномально сформированных зубов и корректировки их нормального развития, представлялось важным проанализировать структурные изменения, произошедшие в результате химиотерапевтического лечения на этапе формирования тканей. Такое исследование было проведено с использованием современных физических методов: рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии (спектроскопии комбинационного рассеяния). Эти методы, являются чрезвычайно эффективными для изучения структурных изменений органоминеральных соединений в тканях зубов. Неразрушающие структуру исследуемого образца принципы этих методов, простота подготовки образцов для анализа, а также инструментальные возможности современных приборов, позволяют проводить экспрессный качественный и количественный структурный анализ, проводить оценку степени кристалличности, соотношения минеральной и органической составляющих тканей.

В работе изучались шлифы в сагиттальной плоскости свежеудаленных по ортодонтическим и терапевтическим показаниям постоянных зубов детей в возрасте 9-14 лет, здоровых пациентов и пациентов, получавших противоонкологическое лечение химиотерапевтическими препаратами. Анализ структуры тканей проводился на рентгеновском дифрактометре Empyrean Panalytical, спектры комбинационного рассеяния снимались на Рамановском спектрометре RamanFlex400 PerkinElmer с использованием оптоволоконного зонда. Анализ морфологии поверхностей шлифов проводился методом Сканирующей электронной микроскопии на Quanta 3D FEG FEI.

Экспериментальные результаты, проведенные на серии зубов одного типа, периода развития и терапевтического воздействия, позволили установить, что химиотерапевтическое лечение пациентов на этапах формирования постоянных зубов приводит к нарушению минерализации и даже к деминерализации эмалевой зоны, снижению кристалличности главной структурной минеральной составляющей ткани, гидроксиапатита. Исследования показали структурные нарушения в тканях зубов даже внешне неизмененных, подвергавшихся действию химиотерапии в процессе их формирования.

Инструментальное выявление структурных изменений в тканях постоянных зубов, сформировавшихся после химиотерапевтического лечения, позволили получить более четкое представление о физиологических особенностях аномального формирования тканей. Это оказалось особенно важно, как для расшифровки некоторых сторон патогенеза некаризоных патологий зубов, планирования и проведения ортодонтического, ортопедического лечения, и к обоснованию профилактических лечебных мероприятий [2].

[1] Короленкова М.В. //Стоматология. 2015. Т. 94. № 3. С. 45-49.

[2] Короленкова М.В. // Вестник РОНЦ им. Н.Н. Блохина РАМН. – 2015. - №1 (26). – С.63-68

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ УГЛЕВОД-СВЯЗЫВАЮЩЕГО МОДУЛЯ СЕМЕЙСТВА 54 ИЗ ЛАМИНАРИНАЗЫ Lic16A *CLOSTRIDIUM THERMOCELLUM*

Кислицын Ю.А.[1], Самыгина В.Р.[1], Куранова И.П.[1], Дворцов И.А.[2], Лунина Н.А.[2], Великодворская Г.А.[2], Демидюк И.В.[2], Костров С.В.[2]

[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2] ФГБНУ ИМГ РАН

e-mail: kislitsinyalex@hotmail.com

Ферменты, гидролизующие углеводы, широко распространены в природе. Такие ферменты обычно имеют сложную структуру и, помимо каталитического, содержат один или несколько вспомогательных модулей, разделённых подвижными линкерными последовательностями и способных функционировать в изолированном состоянии. В основном, это углевод-связывающие модули (CBM), различающиеся структурой и специфичностью [1]. Многообразие CBM, делает их привлекательной моделью для изучения механизмов белкового узнавания. Кроме того, CBM перспективны для использования в различных областях биотехнологии [2].

Ранее нами был охарактеризован CBM из ламинариназы Lic16A C.thermocellum (ctCBM54), ставший прототипом нового впервые обнаруженного нами 54-го семейства CBM [3]. Задачей данной работы стало получение кристаллов ctCBM54, пригодных для определения пространственной структуры белка методом рентгеноструктурного анализа.

Для получения препаративных количеств ctCBM54 нами был сконструирован рекомбинантный продуцент на основе E. coli. Белок очищен до электрофоретически гомогенного состояния. Кристаллизацию проводили в висячей капле при концентрации белка 15 мг/мл методом диффузии паров растворителя. Кристаллы были получены при использовании в качестве осадителя 1,8 М малоната натрия pH 7,0. Набор дифракционных данных от кристаллов был собран на источнике синхротронного излучения ALBA (Испания) до разрешения 2.1 Å. Установлено, что кристаллы белка принадлежат к пространственной группе P6322 с параметрами ячейки a=b=130,15 Å, c=131,05 Å.

Таким образом, нами впервые получены пригодные для рентгеноструктурного анализа кристаллы углевод-связывающего модуля семейства 54, что открывает возможность для установления первой пространственной структуры представителя этого семейства.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований (№14-04-00308) и программой Президиума РАН «Молекулярная и клеточная биология».

[1] Coutinho P. M, Henrissat B. // Recent Advances In Carbohydrate Bioengineering, 1999 г, с 3–12.

[2] John R. P, Anisha G. S, Nampoothiri K. M. & Pandey A.M. //. Bioresour Technol., 2011 г, № 102, с 186-193

[3] Zverlov, V.V., Volkov I.Y., Velikodvorskaya T.V., & Schwarz W. H. // Microbiology, 1997 г, № 143, с 1701-1708

СТАНДАРТНЫЕ ОБРАЗЦЫ ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЕЩЕСТВ С ВОДОРОДНЫМ ТИПОМ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кодесс Б.Н[1]., Норе Н.[2], Бескровный А.И.[3], Бобриков И.А.[3], Нечаева Е.Н.[1]
[1] ФГУП «ВНИИМС», Росстандарт
[2] University of California
[3] ОИЯИ
kodess@mail.ru

Дифрактометрические методы используются для создания лекарственных препаратов благодаря тонкому анализу структурных особенностей макромолекул и контролю замещения групп атомов в этих молекулах. Результаты измерений на монокристаллах обеспечивают созданию «портрета» исходного и затем модифицированного вещества в кристаллическом состоянии. Для поликристаллов эти методы являются арбитражными для определения концентрации активного вещества в биологически активных препаратах. Для метрологического обеспечения измерений нами проведены исследования моно- и поликристаллов веществ семейства KDP-DKDP с заметным вкладом водородного типа химической связи и наличием типичных (для многих биологических веществ) PO4 групп. Для получения воспроизводимости структурных характеристик в межлабораторных экспериментах получены данные на различных лабораторных, синхротронных и нейтронных дифрактометрах при различной температуре в диапазоне 10-330К. Это семейство веществ ранее уже было использовано для создания эталонных средств измерений – стандартного образца РН, поскольку его значение близко к соответствующему значению РН крови человека. Кроме того, они широко используются как стимулирующие подложки для роста монокристаллов биологических макромолекул. Образцы с высоким содержанием дейтерия используются в преобразователях мощных лазерных источников.

Результаты показывают, что исследованная нами партия может быть предложена для проведения более широко межлабораторного эксперимента, МЛЭ, и аттестации этой партии как Государственного стандартного образца (ГСО), в системе существующих отечественных и международных ГСО дифракционных свойств. Образцы могут быть предоставлены всем желающим участвовать в расширенном МЛЭ.

ПОЛУЧЕНИЕ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ БИОГЕННЫХ НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА

Комова А.В., Мельникова А.А., Камышинский Р.А., Светогоров Р.Д., Трунькин И.Н., Пресняков М.Ю., Зубавичус Я.В., Алиев Р.О., Намсараев З.Б.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: komovaav@gmail.com

Селен является микроэлементом, необходимым для функционирования живых организмов. Известно, что элементный селен биогенного происхождения обладает большей биодоступностью по сравнению с элементным селеном, полученным химическим способом [1, 2]. Данная работа посвящена получению биодоступного аморфного красного селена с помощью микроорганизмов и исследованию полученных наночастиц с целью дальнейшего использования при исследованиях метаболизма селена у живых организмов.

Для получения аморфного красного биогенного селена в работе использовались аноксигенные фототрофные бактерии. При фотогетеротрофном росте в анаэробных условиях на свету и в присутствии органических соединений происходило неспецифическое восстановление селенита натрия, вносимого в среду для культивирования, с образованием однородных по размеру наносфер аморфного селена размером 280±45 нм, которые далее очищались от среды и клеток микроорганизмов. Для сравнения наночастицы селена были получены химическим путем. Оба типа наночастиц исследовались при помощи методов электронной микроскопии (STEM) и рентгеновских методов (XRD, XANES). Показано, что биогенные наночастицы селена по размеру более однородны, чем известные из литературы аналоги и химически полученные наночастицы. Наряду с высокой степенью очистки от органических примесей, это делает полученные наночастицы селена перспективными для использования в исследованиях метаболизма селена у микроорганизмов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-34-00346.

[1] Herbel M.J., Switzer Blum J. et al. // Geomicrobiol. J., 2003, V. 20, p. 587-602.

[2] Oremland R.S., Herbel M.J. et al. // Appl. Environ. Microb., 2004, p. 52-60.

МЕТОДЫ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ ДЛЯ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ХИРУРГИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ВОЛОКОННЫХ ЛАЗЕРОВ.

Коновалов А.Н., Дмитриев А.К., Кортунов В.Н., Ульянов В.А.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
-mail: alex_konov@mail.ru

Разработка роботизированных хирургических систем и, так называемых, “умных” скальпелей, для проведения малотравматичных операций, являются одними из важных направлений современной хирургии [1,2].

Нами исследованы возможности организации обратной связи на основе различных физических принципов для реализации концепции “умного” скальпеля на базе волоконных лазеров. Исследованы способы организации обратной связи на основе регистрации и анализа сигналов, поступающих с зоны воздействия излучения волоконного лазера на биоткань: доплеровский сигнал обратного рассеяния; сигнал свечения; механическое сопротивление движению волокну, которая оказывает биоткань при еѐ перфорации.

Получены доплеровские спектры обратного рассеяния, возникающие при контактном и бесконтактном воздействии волоконного Er лазера на биомодели и биоткани разного типа. Исследован эффект свечения, возникающий на дистальном торце волокна при воздействии излучения волоконных лазеров (Er лазер, □ = 1.54 мкм, Tm, □ = 1.98 мкм) на биоткани. Исследованы температурные поля и спектры свечения, формирующиеся при перфорации биомоделей такими лазерами. Проведены исследования сигнала механосенсорной системы при перфорации биомоделей и биотканей разного типа. Измерена сила сопротивления, которая возникает при перемещении волокна вглубь образцов в зависимости от скорости перфорации и мощности излучения волоконного лазера. Показано, что при перфорации биотканей, имеющих отличия по своим физическим параметрам, сила сопротивления, оказываемое волокну, разная. Проведены исследования динамики сигналов обратной связи при перфорации составных модельных образцов, состоящих из биомоделей и биотканей разного типа.

Показано, что при переходе оптоволокна от воздействия с одной ткани к другой происходит изменение регистрируемых сигналов. Различие в регистрируемых сигналах при воздействии излучения волоконного лазера на разные биомодели позволяет реализовать оперативную дифференциальную диагностику типа испаряемой биоткани.

[1] Rivera-Serrano C., Johnson P, Zubiate B, Kuenzler R, Choset H, Zenati M, Tully S, Duvvuri U., “A Transoral Highly Flexible Robot: Novel Technology and Application”// The Laryngoscope, 2012, 122, p. 1067-71.

[2] Дмитриев А.К., Коновалов А.Н., Кортунов В.Н., Ульянов В.А., “«Умные» лазерные скальпели для роботизированной хирургии”// Альманах клинической медицины, 2016, том 44, с. 172–178.

ВОЛНОВОДНЫЕ СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ CO_2-ЛАЗЕРНЫХ ХИРУРГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Кортунов В.Н., Ульянов В.А., Дмитриев А.К., Коновалов А.Н.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: vnkor@yandex.ru

В лазерной хирургии для доставки излучения CO2 лазеров к операционному полю стали широко применяться волноводы: полые и ИК световоды. Механическая гибкость и небольшие поперечные размеры дают возможность использования их в CO2-лазерной эндохирургии. Ввиду невозможности зрительного контроля операционного в качестве оперативной диагностики процесса лазерного испарения биотканей в этом случае можно использовать метод автодинного детектирования по обратно рассеянному излучению из зоны выпаривания.

В экспериментах использовались: 1) ИК световод - оптоволоконный кабель PIR со световодной жилой диаметром 630/700 мкм из суперчистых AgCl:AgBr твердых кристаллов, прозрачные в диапазоне 4-18 мкм; и 2) полый волновод из тонкой кварцевой трубки с диаметром 500 мкм, внутренняя полость которой покрыта пленками серебра и йода серебра. Торцы световодов были заделаны в стандартные SMA разъемы. В исследованиях применялись одномодовые CO2 лазеры (длина волны 10.6 мкм, максимальная мощность 20 Вт) непрерывного действия с накачкой активной среды постоянным током и с высокочастотной накачкой.

Измерялось пропускание лазерного излучения и распределение интенсивности лазерного излучения на выходе из световодов, а также регистрировался автодинный сигнал в CO2 лазерах КРТ (кадмий-ртуть-теллур) фотоприемником в диапазоне частот 50кГц - 1 МГц от тестового диффузно отражающего вращающегося диска и при испарении биотканей сфокусированным лазерным излучением.

Отношение автодинный сигнал/шум при испарении миокарда и жировой ткани излучением CO2 лазером с ВЧ накачкой среды активной для оптоволоконного кабеля PIR составило 2, для этого полого кабеля 1.

При использовании CO2 лазера с накачкой активной среды постоянным током отношения S/N для световодных систем доставки удается увеличить в 2 -3 раза.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ МАТРИКСОВ НА ОСНОВЕ ФИБРОИНА ШЕЛКА ДЛЯ ТКАНЕВОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Котлярова М.С.[1], Багров Д.В.[1], Жуйков В.А.[2], Чудинова Ю.В.[1,2], Гончаренко А.В.[1], Шайтан К.В.[1]
[1]*Биологический факультет МГУ*
[2]*ФИЦ Биотехнологии РАН*
e-mail:kotlyarova.ms@gmail.com

Тканевая инженерия – наука, направленная на создание биоискусственных органов и тканей. Ключевым компонентом искусственно созданного органа или ткани является матрикс, который служит в качестве субстрата для клеток и обеспечивает структурную целостность [1]. Фиброин шелка является одним из наиболее прочных природных полимеров и обладает привлекательными свойствами для создания матриксов – биосовместимостью и биоразлагаемостью.

В данной работе была изучена структура матриксов, изготовленных из фиброина и смеси фиброина с желатином. Исследована способность полученных матриксов поддерживать адгезию и пролиферацию остеобластоподобных клеток MG-63.

Было обнаружено, что матриксы обоих типов обладают высокой степенью пористости (более 90%), имеют размер пор составляет 220±65 мкм и 250±80 мкм соответственно, поддерживают адгезию и пролиферацию клеток MG-63.

Таким образом, матриксы на основе фиброина, могут быть использованы для восстановления костной ткани. Минерализованные формы матриксов, вероятно, более перспективны для ее регенерации [2]. Целесообразно изучение зависимостей изменения молекулярной структуры фиброина от способа приготовления матрикса с помощью рентгеноструктурного структурного анализа [3].

Работа осуществляется при поддержке Минобрнауки РФ по Соглашению о предоставлении субсидии от 27 октября 2015 г. №14.607.21.0119, уникальный идентификатор соглашения RFMEFI60715X0119.

[1]. Moisenovich M.M., Pustovalova O. et al. //. Biomaterials, 2012, V. 33, V.15, P. 3887-3898

[2]. Moisenovich, M M., Arkhipova, A Yu. et al. // Acta naturae, 2014, V.6, N. 1, P. 96-101

[3]. Yang Y., Ding F. et al. // Biomaterials, 2007, V. 28, P. 5526–5535

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОЛИГОМЕРНЫХ ФОРМ БЕЛКА ПАРКИН.

Крюкова М.В., Липкин А.В., Качалова Г.С.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: mar-1-ya@yandex.ru

Современные представления о молекулярных механизмах патогенезиса болезни Паркинсона выделяют ключевую роль белка Паркин в развитии нейродегенеративных нарушений. Паркин классифицирован как RING E3 убиквитин лигаза, функцией которой является присоединение убиквитина к поврежденному белку как метки, инициирующей его деградацию протеосомой.

В вектора, кодирующие N-терминальные GST и MBP таги были встроены гены полноразмерного Паркина(Prk) и белка R0R1, содержащего RING0, RING1 домены паркина, и являющегося близким гомологом естественной изоформы человеческого паркина-TV7. Рекомбинантные белки проклонированных конструкций экспрессировали с использованием штаммов *E.Coli.* Целевой белок из лизатов разрушенных ультразвуком клеток очищали с помощью аффинной хроматографии соответствующей N-терминальному тагу, и далее фракционировали по молекулярным весам с использованием size exclusion хроматографии. Более 90 % процентов наносимых на колонку Superdex 200 рекомбинантных белков элюировалось в свободном объеме используемой колонки, т.е. в виде олигомеров с млекулярным весом не менее 10^3kD. Была проведена оценка размеров олигомеров с учето результатов, полученных методами SAXS и сканирующей зондовой микроскопии. По данным малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения растворов олигомерного белка GST-Prk на станции BioSAXS (ESRF). были определены глобальные геометрические параметры: средние максимальные расстояния около 140nm, средние значения радиуса инерции 42nm. При.измерениях на слюдяной подложке образцов GST-Prk с помощью сканирующего зондового микроскопа выявлялись только конгломераты 50-200nm. Таким образом было установлено, что олигомерные формы гибридных белков Prk с GST тагом могут содержать порядка 5-14 мономеров GST-Prk.

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НУКЛЕОСОМ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С БЕЛКАМИ МЕТОДОМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ МИКРОСКОПИИ ОДИНОЧНЫХ ЧАСТИЦ

Кудряшова К.С.[1,2], Любителев А.В.[1], Герасимова Н.С.[1], Михайлова М.С.[1], Чертков О.В.[1,2], Студитский В.М.[1,3], Кирпичников М.П.[1,2], Феофанов А.В.[1,2]
[1]*Биологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова*
[2] *Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН*
[3]*Программа эпигенетики рака, Центр исследований рака Фокс Чейз, Филадельфия, США*
e-mail: avfeofanov@yandex.ru, Vasily.Studitsky@fccc.edu

Изменения структуры хроматина под действием различных факторов вовлечены в регуляцию процессов метаболизма клеток. Мононуклеосомы, которые

формируются из четырех пар коровых гистонов и короткой (~200 п.н.) ДНК, содержащей нуклеосом-позиционирующую последовательность, являются удобной экспериментальной системой для изучения структурной организации хроматина и его реорганизации в комплексах с ремоделерами хроматина, гистоном H1 и РНК-полимеразой. Прогресс, достигнутый в развитии методов флуоресцентной микроскопии, позволяет дополнить традиционные биохимические и молекулярно-биологические подходы микроскопическим анализом структуры одиночных нуклеосом и их комплексов на основе эффекта Фёрстеровского резонансного переноса энергии (spFRET-микроскопия) [1-4]. spFRET-микроскопия дает возможность распознавать и характеризовать структурно различающиеся субпопуляции нуклеосом в гетерогенных образцах с проведением статистически достоверного анализа на больших выборках.

Мы докладываем о разработке матрицы ДНК, на основе которой собраны нуклеосомы с двумя линкерами длиной по 40 пар нуклеотидов, меченными флуорофорами Cy3 (донор) и Cy5 (акцептор). Методом spFRET-микроскопии выявлено, что нуклеосомы характеризуются двумя равновероятными конформациями ДНК-линкеров. Обнаружено, что линкерный гистон H1.5 и поли-АДФ-рибоз-полимераза 1 (PARP1) связываются с нуклеосомами в наномолярном диапазоне концентраций, существенно, но по-разному меняя конформацию линкеров. Эти комплексы характеризуются быстрой кинетикой ассоциации и медленной кинетикой диссоциации.

Разработанные мононуклеосомы являются флуоресцентными сенсорами конформационных перестроек в области линкеров и в комбинации с spFRET-микроскопией могут быть использованы для изучения важных аспектов структурной организации нуклеосом в комплексах с различными видами архитектурных белков.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президиума РАН.

[1] Buning R., van Noort J. // Biochimie, 2010, V. 92, P. 1729-1740.

[2] Lee J.Y., Lee T.H. // Biochim. Biophys. Acta, 2012, V. 1824, P. 974-982.

[3] Kudryashova K.S., Chertkov O.V., et al. // Methods Mol. Biol., 2015, V. 1288, P. 395-412.

[4] Feofanov A.V., Kudryashova K.S., et al. // Springer Proc. Phys., 2015, V. 164, P. 255-260.

САМООРГАНИЗАЦИЯ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ И ЭТИЛЕНОКСИДА

Кузнецов Н.М.[1], Разуваева Е.В.[1,2], Загоскин Ю.Д.[1], Кулебякина А.И.[1], Стрельцов Д.Р.[1,2], Чвалун С.Н.[1,2], Штыкова Э.В.[3]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2]ИСПМ им. Ениколопова РАН

[3]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: kyz993@ya.ru, harikri6na@ya.ru

В водной среде амфифильные блок-сополимеры способны к самоорганизации в надмолекулярные структуры, морфологию которых можно контролировать, изменяя состав, архитектуру, молекулярную массу блок-сополимера, что делает такие мицеллы перспективными для применения в качестве носителей лекарственных веществ.

Объекты исследования - амфифильные двойные и тройные блок-сополимеры на основе молочной кислоты и этиленоксида с различным соотношением длин гидрофобного и гидрофильного блоков (варьировали только длину лактидных блоков). Эти сополимеры являются не токсичными, биосовместимыми, биодеградируемыми. Исследование заключалось в изучении влияния архитектуры и состава блок-сополимеров на строение и свойства получаемых на их основе мицеллярных структур методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Данные измерены на синхротроне Petra III (DESY, Гамбург) малоугловая линия P12. Исследуемые блок-сополимеры в воде образуют сложную двух-уровневую систему, включающую в себя как изолированные мицеллы, так и упорядоченную надмицеллярную структуру. Для двойных блок-сополимеров при увеличении длины лактидного блока с 64 до 418 звеньев, наблюдалось парадоксальное уменьшение межплоскостного расстояния, чего нельзя сказать о тройных блок-сополимерах при росте длины лактидного блока с 30 до 120 звеньев. Все образцы демонстрировали высокую степень полидисперсности. Была предложена теоретическая модель системы, основанная на данных МУРР, динамического светорассеяния, атомно-силовой микроскопии и крио-просвечивающей электронной микроскопии.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект 16-03-00375.

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ФЛАВОЦИТОХРОМ С СУЛЬФИДДЕГИДРОГЕНАЗЫ ИЗ *THIOALKALIVIBRIO PARADOXUS*

Лильина А.В.[1], Осипов Е.М.[1], Тихонова Т.В.[1], Попов В.О.[1,2]

[1] Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Москва

[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»

e-mail: a-lilina@mail.ru

Одним из ключевых ферментов серного метаболизма бактерий является флавоцитохром С сульфиддегидрогеназа (FCC). Известно строение FCC из *A. vinosum* и *T. tepidum*. В этих организмах FCC – гетеродимер, состоящий из флавиновой субъединицы и двухгемового цитохрома.

FCC был выделен из бактерии *Tv. paradoxus*, выращенной на тиоцианате в присутствии избытка Cu^{2+}. *In vitro* фермент катализирует окисление сульфида, используя в качестве акцептора электронов цитохром С из сердца лошади. Кинетические параметры реакции при 25°C и $pH_{опт}$ 8.5: $V^{каж}_{max}$ = 54±9 мкмоль цитохрома С в минуту на 1 мг FCC, $K^{каж}_{м}$= 1.9±0.4 и 8±3 мкМ для сульфида и цитохрома С соответственно при фиксированной концентрации второго субстрата 20 мкМ.

На синхротроне в ESRF (Франция) с монокристаллов FCC был собран набор дифракционных данных с разрешением 2,7 Å. Независимая часть элементарной ячейки содержит гетеротетрамер, состоящий из флавиновой, гемовой и двух медьсвязывающих субъединиц. Флавиновые субъединицы FCC из *Tv. paradoxus,* A. *vinosum* и *T. tepidum* имеют сходный ход полипептидной цепи. FCC из *Tv. paradoxus* содержит только один гем. Медьсвязывающие субъединицы подобны белку CopC из *E. coli*, имеющему центры связывания Cu+/Cu2+ и предположительно отвечающему за устойчивость к меди. Медьсвязывающие субъединицы отличались от CopC наличием α-спирали и способностью связывать только Cu2+. Гетеротетрамер, состоящий из FCC и димера CopC-подобного белка ранее не описан. Сокристаллизация этих белков может быть связана с ролью этого комплекса в метаболизме меди и серы *in vivo*.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 14-24-00172

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СВЯЗНЫХ МАСОК ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ ИЗОБРАЖЕНИЯ ИЗОЛИРОВАННОЙ ЧАСТИЦЫ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ.

Лунина Н.Л., Петрова Т.Е., Лунин В.Ю.

Институт математических проблем биологии РАН - филиал ФИЦ «ИПМ им. М.В. Келдыша РАН»

e-mail: lunina@impb.psn.ru

Дискретизация интенсивностей рассеяния изолированной частицей на регулярную сетку в обратном пространстве позволяет рассматривать задачу восстановления изображения частицы как фазовую проблему для «воображаемой» кристаллической структуры. Нами предложена методика решения фазовой проблемы на начальной стадии исследования ([1-3]), опирающаяся на такие свойства распределения электронной плотности в объекте, как компактность, связность и возможность аппроксимации распределения плотности бинарными функциями (масками). На первом этапе работы генерируется большое число случайных связных масок, для которых рассчитываются значения модулей и фаз структурных факторов. Фазовые наборы, отвечающие маскам с высокой корреляцией рассчитанных и экспериментальных значений модулей, выравниваются и усредняются. На последующих этапах генерация случайных масок производится с учетом фазовой информации с предыдущего этапа. Тестовые расчеты, проведенные в зоне разрешения до 25 Å со смоделированными данными рассеяния тримером фотоситемы I (1JBO, [4]), позволили получить синтез Фурье, обладающий корреляцией 94% с точным синтезом аналогичного разрешения.

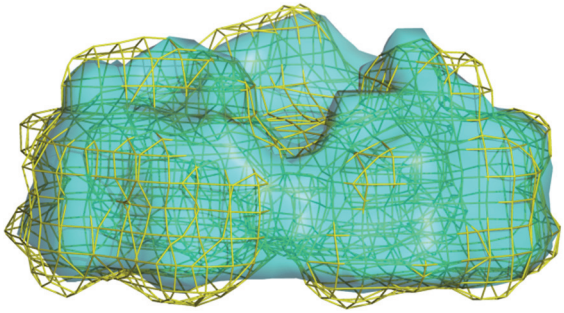


Рис.1. Тестовое определение [2] маски частицы (поверхность) для тримера фотосистемы I. «Сеткой» показан точный синтез Фурье разрешения 25 Å.

[1] Лунин В.Ю. и др. // Математическая биология и биоинформатика, 2014, том 9, № 2, с 543-562.

[2] Лунина Н.Л. и др. // Математическая биология и биоинформатика, 2015, том 10, № 2, с 508-525.

[3] Lunin V.Y. et al. // Acta Cryst. D, 2016, v 72, p 147-157.

[4] Jordan P. et al. // Nature, 2001, v 411, p 909-917.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ КАПСУЛЫ ДЛЯ ВКЛЮЧЕНИЯ ГИДРОФОБНЫХ АНТИРАКОВЫХ ПРЕПАРАТОВ

Лысова Е.Ю.[1,2], Букреева Т.В.[1,3], Гилева А.М.[2], Марквичева Е.А.[2], Бородина Т.Н.[1]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *ИБХ РАН*
[3] *НИЦ «Курчатовский институт»*
e-mail: tatiana_borodina@hotmail.com

В настоящее время активно ведутся исследования в области создания новых средств доставки липофильных противоопухолевых препаратов. Весьма перспективным направлением для создания носителей функциональных соединений является получение полимерных контейнеров с применением низкочастотного ультразвука. Данный метод основан на явлении ультразвуковой кавитации, индуцирующей физико-химические взаимодействия на границе раздела фаз масло/вода в первичной эмульсии, что приводит к формированию стабильной полимерной оболочки [1].

Целью работы являлось получение и исследование биосовместимых полимерных контейнеров на основе природных полисахаридов - ксантановой камеди и ДЕАЕ-декстрана. Была изучена и продемонстрирована зависимость размера контейнеров (300 нм - 5 мкм.) от отношения дисперсная фаза/дисперсионная среда. В качестве модельных водонерастворимых соединений для инкапсулирования были использованы гексан, миглиол, соевое масло, а также тимохинон (липофильное природное соединения, обладающее противоопухолевыми свойствами). В работе показана возможность модификации поверхности контейнеров на примере электростатической адсорбции поли-L- лизина. Измерения электрофоретической подвижности показали изменение заряда поверхности от -40 mV до +25 mV (внешний слой – поли-L- лизин). Предлагаемый в данной работе подход позволит создать биодеградируемые полимерные микроконтейнеры на основе природных полисахаридов, поверхность которых может быть функционализирована широким спектром соединения, в том числе с целью адресной доставки.

[1] Szalay S. Z. // Phys. Chem. 1933, 164, 234 – 240.

СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ КАРБОСИЛАНОВЫХ ДЕНДРИМЕРОВ С СИЛОКСАНОВОЙ ОБОЛОЧКОЙ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЕНКАХ

Малахова Ю.Н.[1,2], Бузин А.И.[3], Brezesinski G.[4], Чвалун С.Н.[1-3], Музафаров А.М.[3,5]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *МИТХТ*
[3] *ИСПМ РАН*
[4] *MPI CI*
[5] *ИНЭОС РАН*
e-mail: j.malakhova@mail.ru

Макромолекулы карбосилановых дендримеров состоят из ядра трехмерной архитектуры и оболочки, содержащей известное число концевых групп (рис. 1а). Структурообразование дендримеров в ленгмюровских пленках определяется номером генерации ядра и природой оболочки. Это показано на примере дендримеров третьей (низкой) или пятой и шестой (высокой) генерации с линейными или циклическими силоксановыми последовательностями в оболочке.

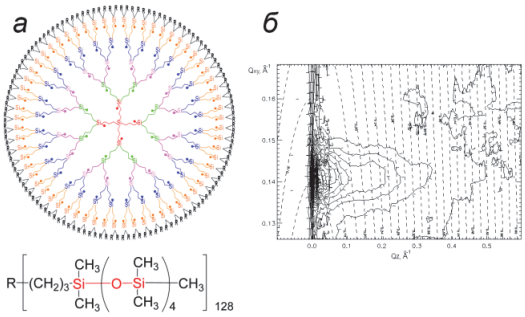


Рис.1. Карбосилановый дендример пятой генерации с линейными силоксановыми последовательностями в оболочке (а), его GIXD в ленгмюровском монослое (б).

Поведение дендримеров низких генераций в ленгмюровских пленках схоже с поведением олигомерных аналогов другой архитектуры: форма изотермы поверхностного давления (π-A) определяется конформационными переходами молекул и коллапсом монослоя.

При сжатии ленгмюровских пленок дендримеров высоких генераций π и поверхностный потенциал ступенчато возрастают, и характерное отношение площадей на молекулу в точках начала плато близко к 1:0.5:0.33. Это свидетельствует о формировании полислоев и подтверждается данными брюстеровской микроскопии и GIXD. Было обнаружено упорядочение макромолекул-частиц дендримера пятой генерации в каждом слое (рис. 1б) и увеличение толщины ленгмюровской пленки для каждой ступени на π-A изотерме. Гексагональная упаковка макромолекул-частиц сохранялась в пленках Ленгмюра-Блоджетт, что подтверждено атомно-силовой микроскопией.

Для дендримеров с трехчленными напряженными силоксановыми циклами в оболочке было обнаружено изменение параметров π-A изотерм при последовательных циклах сжатия-расширения, что указывает на частичный гидролиз оболочки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №16-33-60194 мол_а_дк, №16-03-00379 а.

ВИРУСНЫЕ ИНФЕКЦИИ И НЕЙРОПСИХОЛОГИЧЕСКИЙ ПРОФИЛЬ КОГНИТИВНЫХ РАССТРОЙСТВ

Малашенкова И.К.[1], Хайлов Н.А.[1], Крынский С.А.[1], Огурцов Д.П.[1,2], Казанова Г.В.[1], Величковский Б.Б.[1], Селезнева Н.Д.[3], Федорова Я.Б.[3], Пономарева Е.В.[3], Колыхалов И.В.[3], Гаврилова С.И.[3], Дидковский Н.А.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский Институт»

[2] ФГБУ «ФНКЦ физико-химической медицины ФМБА России»

[3] ФГБНУ «Научный центр психического здоровья»

e-mail: srgkr002@gmail.com

У 20 больных с болезнью Альцгеймера (11 б-х с ранним началом (БАРН), 9 б-х с поздним началом (БАПН)) оценивали когнитивные функции (MMSE, шкала лобной дисфункции, Бостонский тест называния) и определяли ДНК герпесвирусов (EBV, HHV-6, HHV-7) в слюне и в клетках крови. Методом ELISA определяли уровень IFNγ в сыворотке крови.

Частота определения EBV в слюне при болезни Альцгеймера была выше, чем в контрольной группе ($p<0,05$). Вирус HHV-6 в слюне при раннем начале БА выявлялся у всех б-х, при позднем у 7 из 10, в контрольной группе у 9 из 31 ($p > 0,05$). У б-х с БАПН, имевших уровень EBV в слюне более 104 копий/мл, был выше IFNγ в сыворотке крови, чем у больных БАПН с низким уровнем ДНК EBV (302,3±55,9 пг/мл и 132,8±32 пг/мл, $p = 0,003$).

В крови пациентов с БАРН HHV-6 и HHV-7 выявлялись чаще, чем при БАПН и в контрольной группе. ДНК HHV-6 и/или HHV-7 выявлялась у 6 из 10 б-х с БАРН, у 1 из 8 б-х с БАПН ($p<0.05$) и у 0 из 31 в контрольной группе ($p<0.05$). При сравнении результатов когнитивных тестов наличие HHV-6 и HHV-7 в крови ассоциировалось с более низкими баллами Бостонского теста называния ($p=0.002$). Достоверной связи с результатами других когнитивных тестов не было.

Наличие ДНК HHV-6 и HHV-7 в крови - маркер активной инфекции, вызванной этими вирусами [2]. Таким образом, при БАРН частота активной HHV-6 и HHV-7 инфекции повышена, что соответствует более выраженному нарушению речевой функции. Необходимы структурные исследования белков HHV-6 и HHV-7 и изучение их взаимодействия с амилоидом-бета.

ДЕГИДРАТАЦИОННАЯ СТРУКТУРИЗАЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ В ОЦЕНКЕ СИСТЕМНЫХ ЭФФЕКТОВ ЭКЗОГЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ БИОРАДИКАЛОВ

Мартусевич А.К.[1-3], Ковалева Л.К.[2], Мартусевич А.А.[4], Давыдюк А.В.[3]

[1] ФГБУ «ПФМИЦ» Минздрава Росси

[2] ГБОУ ВПО Кировская ГМА Минздрава России

[3] ФГБОУ ВО «НГСХА»

[4] ФГАОУ ВО «ННГУ им. Н.И. Лобачевского»

e-mail: cryst-mart@yandex.ru

Показано, что кристаллоскопические методы позволяют получить обобщенные сведения о составе и физико-химических свойствах биологической жидкости. На этом основании целью работы явилось исследование информативности методов биокристалломики в оценке системных эффектов экзогенных источников биорадикалов.

Нами выполнена совокупность экспериментов in vitro (на образцах крови человека) и in vivo (с использованием лабораторных животных – крыс линии Вистар). В качестве действующих факторов использовали свободный (газообразный) и депонированный (в форме динитрозильных комплексов железа с различными лигандами) монооксид азота, а также активные формы кислорода (молекулярный кислород, синглетный кислород, озон в газообразном виде и в форме озонированного физиологического раствора). Основным анализируемым биосубстратом служила сыворотка крови. Исследование осуществляли путем применения динамических и статических кристаллоскопических и тезиграфических методов.

Установлено, что различные активные формы кислорода и оксид азота достаточно специфично трансформируют кристаллогенные свойства биологических жидкостей, причем направленность и выраженность данного эффекта находится в нелинейной зависимости от дозы агента. Общей тенденцией является двухфазная зависимость с прямой пропорциональностью модуля сдвигов концентрации соединения при действии низких количеств соединений, а при достижении определенного порогового значения – обратной зависимостью между ними.

Исследование поддержано грантом Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых-докторов наук (грант МД-7256.2015.7).

ОНТОГЕНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛОГЕННЫХ СВОЙСТВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ ОРГАНИЗМА

Мартусевич А.К.[1-3], Прудникова З.И.[2], Кривоногова П.Л.[4], Козлова Л.М.[1]

[1] ФГБУ «ПФМИЦ» Минздрава России

[2] ГБОУ ВПО Кировская ГМА Минздрава России

[3] ФГБОУ ВО «НГСХА»

[4] ГБОУ ВПО «Нижегородская ГМА» Минздрава России

e-mail: cryst-mart@yandex.ru

Целью данного исследования явилось установление особенностей инволютивной модификации кристаллогенной активности сыворотки крови и слюны человека.

В исследование включены практически здоровые добровольцы, распределенные на 4 возрастные группы: 14-18 лет (n=18), 19-45 лет (n=27), 45-60 лет (n=25) и старше 60 лет (n=22). У всех обследованных лиц однократно получали образцы слюны и крови (с последующим выделением сыворотки), из которых отбирали необходимый объем на кристаллоскопические исследования. Изучение кристаллогенных и инициирующих свойств сыворотки крови и слюны производили по методике тезиокристаллоскопии (Мартусевич А.К., Гришина А.А., 2009). В тезиграфическом тесте применяли 0,9% раствор хлорида натрия. Описание результатов дегидратации осуществляли морфологически, а также путем визуаметрии с использованием собственной системы полуколичественных параметров (Мартусевич А.К., 2012).

Установлено, что общей тенденцией, характеризующей возрастные изменения кристаллогенных свойств в обеих изучаемых биологических жидкостях, являлись умеренное повышение кристаллизуемости, снижение индекса структурности с уменьшением линейных размеров элементов, нарастание степени деструкции последних в сочетании с небольшим сужением краевой зоны фации. Следует подчеркнуть, что выявлена сонаправленность этих сдвигов в слюне и сыворотке крови, подтвержденная результатами корреляционного анализа.

В целом, выделены особенности трансформации характера дегидратационной структуризации слюны и сыворотки крови, причем эта динамика имеет единый вектор, что свидетельствует об универсальности указанных сдвигов.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЙ БИОКРИСТАЛЛОМИКИ В ДИФФЕРЕЦИАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКЕ МАСТИТА КОРОВ

Мартусевич А.К.[1-3], Урюпова В.В.[1], Иващенко М.Н.[1]

[1] ФГБОУ ВО «НГСХА»

[2] ГБОУ ВПО Кировская ГМА Минздрава России

[3] ФГБУ «ПФМИЦ» Минздрава России

e-mail: cryst-mart@yandex.ru

Мастит является серьезным, социально значимым заболеванием, имеющим одновременно высокую актуальность как для медицины, так и для ветеринарии и зоотехнии. При этом, если у человека диагностика данного заболевания не представляет особых затруднений, то раннее выявление мастита у коров в условиях хозяйства может быть сопряжено со значительными трудностями. Поэтому целью исследования явилась оценка диагностических и дифференциально-диагностических перспектив методов изучения дегидратационной структуризации молока в отношении мастита коров.

Проведенные клинические исследования позволили подтвердить наличие мастит-ассоциированных сдвигов кристаллогенной активности изучаемой биологической жидкости. Так, у здоровых коров данный биосубстрат обладает относительно слабыми структурообразующими свойствами. Напротив, при манифестирующем или субклиническом воспалении молочных желез присутствующие в молоке патогенные микроорганизмы способствуют резкому нарастанию кристаллогенного потенциала биосреды. Есть также основания полагать о возможности дифференциально-диагностического поиска потенциального возбудителя мастита по особенностям изменения дегидратационной структуризации молока.

В целом, приведенные изыскания позволили создать базис как для скрининга субклинического и манифестировавшего мастита коров (приоритетная справка по заявке на изобретение №2015111884 от 01.04.2015 г.), так и для разработки способа выявления возбудителя заболевания, что дает возможность производить направленный подбор схемы лечения мастита.

Исследование поддержано грантом Нижегородской области в области науки, техники и технологий 2015 года

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ МИКРОКОНТЕЙНЕРЫ ДЛЯ ИНТРАНАЗАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ НА ОСНОВЕ ПОРИСТЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МИКРОЧАСТИЦ

Марченко И.В.[1,2], Волкова Ю.А.[3], Ширинян В.З.[3], Букреева Т.В.[1,2]

[1] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

e-mail: iramarchenko85@mail.ru

Интраназальное введение лекарственных препаратов для доставки в мозг имеет ряд преимуществ таких как неинвазивность, высокая биодоступность и быстрое наступление терапевтического эффекта. Использование контейнеров на основе пористых микрочастиц для интраназального введения может обеспечить доставку целевого вещества за счет удержания системы на эпителии слизистой оболочки, а также позволит предохранить лекарственное соединение от ферментативного расщепления в назальной полости. Полиэлектролитная оболочка контейнеров сможет увеличить их время пребывания в назальной полости благодаря мукоадгезивным свойствам, а также обеспечить пролонгированное высвобождение активного вещества.

В данной работе синтезированы микрочастицы карбонатов кальция и марганца и диоксида титана. Определена и оптимизирована загрузка данных частиц различными формами снотворного препарата золпидема (тартрат, кислота и калиевая соль). Для загрузки использованы два способа: адсорбция на предварительно синтезированные частицы и соосаждение с золпидемом в процессе синтеза частиц. Количество включенного золпидема и динамика высвобождения золпидема из частиц были определены спектрофотометрически. Максимальная загрузка частиц препаратом была достигнута для золпидема в форме тартрата и микрочастиц карбоната кальция и составила 5.4 массовых процента. Проведено нанесение на частицы, загруженные золпидемом, полиэлектролитных оболочек из полисахаридов таких как диэтиламиноэтил-декстран и гиалуроновая кислота. Определено количество загруженного препарата в микроконтейнеры, покрытые оболочками. Показано влияние полиэлектролитной оболочки на высвобождение золпидема из частиц.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ИК РАН при частичной поддержке РФФИ (Грант № 15-33-70032).

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ КОМПЛЕКСЫ ЦИТОХРОМА *С* С МОНОСЛОЯМИ КАРДИОЛИПИНА

Марченкова М.А.[1,2], Бойкова А.С.[1,3], Ильина К.Б.[1,3], Дьякова Ю.А.[1,2], Терещенко Е.Ю.[1,2], Владимиров Ю.А.[1,3], Ковальчук М.В.[1,2]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3]МГУ им. М.В. Ломоносова,

e-mail: marchenkova@ns.crys.ras.ru

Исследования взаимодействия липидных ленгмюровских монослоев, как модели половины липидного бислоя клеточных мембран, с различными белками в условиях, приближенных к нативным, представляют интерес как для решения фундаментальных задач, так и прикладных, например, создание гибридных наносистем.

Одним из интересных объектов исследований является цитохром *c* (Цит*С*) – железосодержащий водорастворимый белок, выполняющий в клетке несколько функций: он участвует в процессах внутриклеточного дыхания, поскольку способен к обратимому одноэлектронному взаимодействию; окисленную форму Цит*С* можно рассматривать в качестве антиоксиданта; будучи связанным с фосфолипидом митохондриальной мембраны *кардиолипином (КЛ)*, играет ключевую роль в запуске процесса запрограммированной гибели клетки – апоптоза.

В данной работе проведены исследования кинетики взаимодействия Цит*С* с ленгмюровскими монослоями бычьего (БКЛ) и тетраолеил кардиолипинов (ТОКЛ) [1], отличающихся составом жирных кислот, в следствии чего ТОКЛ является устойчивым к пероксидации.

Определены константы связывания Цит*С* с БКЛ и ТОКЛ, а также параметры кинетики адсорбции белка на монослое, которые оказались примерно одинаковыми для двух липидов.

Изучены упругие свойства как пленки Цит*С*-КЛ, так и отдельных ее компонент. Особое внимание уделено изучению упругих свойств монослоя Цит*С* при предварительном воздействии на него этанола, который меняет конфигурацию самого белка.

На основе полученных данных выдвинуто предположение об изменении конформации Цит*С* («стратификация») при его адсорбции на границе раздела вода-воздух или при встраивании в монослой КЛ на поверхности жидкости: одна половина глобулы белка становится преимущественно гидрофобной, а другая – гидрофильной. Возможно, что в бислойных мембранах, содержащих КЛ, проникновение Цит*С* в липидный монослой может приводить к образованию складки на мембране с последующим образованием либо «бабблов» внутри бислоя, либо гидрофобных наносфер Цит*С*-КЛ [2], или появлением гидрофильных пор.

1. Marchenkova M.A., Dyakova, Yu.A., Tereschenko, E.Yu. et al. // Langmuir, 2015, Vol. 31, № 45. p. 12426–12436.

2. Владимиров Ю.А., Проскурина Е.В., Алексеев А.В. // Биохимия, 2013, том 78, № 10, с 1391–1404.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА МОДЕЛИРОВАНИЯ ФЕНОМЕНА САМОСБОРКИ

Махиборода, А.В., Ильичёв АВ., Подобин А.А
Департамент прикладной математики МИЭМ, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
makhiboroda@yandex.ru

Наиболее полные экспериментальные данные по наблюдениям процессов самосборки накоплены в вирусологии. В целом доступные данные наблюдений носят фрагментарный, а иногда и противоречивый характер. В этих условиях построение целостной картины возможно только методом реконструкции. Для получения достоверной и обоснованной реконструкции требуется применение математических моделей.

Суть явления самосборки определена как управляемая процедура, для которой вся управляющая информация содержится в компонентах участниках процесса самосборки [1]. Соответствующий язык для описания явления и постановки проблемы предоставляет супрамолекулярная химия [2]. В терминах супрамолекулярной химии мы формулируем основные положения моделирования феномена молекулярной самосборки, которые сводятся к следующему. Если мы наблюдаем алгоритмические формы поведения молекулярных ансамблей – значит ими управляет определённая знаковая система, поддерживающая данный тип алгоритмического поведения. Специфике явления самосборки соответствует алгоритмическая система с распределённым управлением, построенная на базе дискретной динамики и её основного понятия дискретный аттрактор. Основы дискретной динамики изложены в [3]. Местом дислокации знаковой системы, реализующей дискретный аттрактор, должны являться вирусные белки, из которых собирается вирусный капсид.

Для содержательного наполнения обозначенных тезисов разрабатывается гипотеза о кодовых замках, определяющих процедуры прикрепления капсидных белков и о кодовых трансформациях, являющихся следствием управляемой конформации капсидных белков. Построенные таким образом математические модели могут быть основанием для разработки программ поисковых экспериментов, исследующих процессы конформации капсидных белков.

[1] Мецлер Д. // Биохимия в 3 томах Мир 1980, 1504 стр

[2] Жан-Мари-Лен // Супрамолекулярная химия Новосибирск Наука 1998, 332 стр.

[3] Махиборода А.В.и др. // Наноструктуры, математическая физика и моделирование т.14, № 2, 2016, с.25-68

ЭКСПРЕССИЯ И СТАБИЛИЗАЦИЯ РЕКОМБИНАНТНОГО ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО ЭНДОТЕЛИНОВОГО РЕЦЕПТОРА В.

Мишин А.В., Лугинина А.П., Асташкин Р.О., Вартанян Н.А., Гусач А.Ю., Борщевский В.И., Охрименко И.С., Горделий В.И., Черезов В.Г.
Московский физико-технический институт (государственный университет)
e-mail: mishinalexej@gmail.com

В организме человека существуют два типа эндотелиновых рецепторов, ETa и ETb, которые активируются тремя эндогенными 21-мерными циклическими пептидами, ЕТ-1, ЕТ-2, и ЕТ-3, контролирующими различные физиологические процессы, такие как: сужение и расширение кровеносных сосудов, и стимуляция пролиферации клеток. Эти рецепторы вовлечены в такие заболевания, как гипертония, атеросклероз, сердечная и почечная недостаточности и некоторые формы рака. Несмотря на интенсивные исследования в течение 25 лет и наличие более 1000 низкомолекулярных лигандов, полученных для обоих рецепторов, только два из них были одобрены как лекарственные средства. Большинство клинических испытаний завершились безуспешно, в основном из-за недостаточного уровня знаний о структуре эндотелиновых рецепторов и одновременной сложности их биологических функций. Интегрированные структурные, биофизические и биохимические исследования помогут развить более глубокое понимание этих рецепторов и ответить на ряд важных вопросов, таких как: (i) каковы размеры, форма и местонахождения участков связывания лигандов, и в чем заключается природа лиганд-белковых взаимодействий, (ii) существуют ли возможные дополнительные аллостерические участки для связывания модуляторов функции эндогенных лигандов, (iii) какова структура и в чем основа долго-действующей активации через лиганды-агонисты, (iv) образуют ли эндотелиновые рецепторы гомо- или гетеро-димеры и в чем их биологическая значимость и (v) каковы структурные признаки функционально-смещенных состояний (таких как запуск каскада реакций через бета-аррестин). Первый этап этих исследований направлен на получение стабильного солюбилизированного и очищеннго рецептора в монодисперсном состоянии. Данный доклад описывает создание, экспрессию, очистку и характеризацию препарата эндотелинового рецептора В для последующих структурных и функциональных исследований.

Работа проводилась при поддержке РНФ (номер проекта: 16-14- 10273).

УСТАНОВЛЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ПАЛОЧКОВИДНОГО ВИРУСА ПОГРЕМКОВОСТИ ТАБАКА МЕТОДОМ КРИОЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Мишина М.Ю.[1], Печникова Е.В.[2], Макаров В.В.[3], Орехов А.С.[4], Соловьев А.В.[3], Васильев А.Л.[4], Ковальчук М.В.[4], Соколова О.С.[1]

[1]Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, биологический факультет

[2]FEI

[3]НИИ Физико-химической биологии им. Белозерского Московского Государственного Университета

[4]НИЦ «Курчатовский институт»

email: maryia.mishyna@gmail.com

Спиральный вирус погремковости табака (ВПТ) является типовым представителем рода Tobravirus семейства Virgaviridae. На данный момент пространственная структура ВПТ пока малоизучена. Особенностью вируса является формирование твердых палочковидных вирионов, это создает предпосылки для исследований его структуры методом просвечивающей крио-электронной микроскопии (ПКЭМ). Результаты исследований трехмерной структуры ВПТ методом ПКЭМ представлены в настоящей работе.

ВПТ был выделен из листьев *Nicotiana benthamiana,* суспензия очищенных вирусов нанесена на сетку для криоэлектронной микроскопии Quantifoil (Германия) и заморожена в аппарате Vitrobot (FEI). Частицы ВПТ просмотрены в криоэлектронном микроскопе Titan Krios (FEI) при увеличении х 37000 в режиме низкой дозы. Обработка полученных изображений производилась с помощью программного обеспечения: Imagic, Spider, EMAN и Spring.

Для всех микрофотографий определены частотно-контрастные характеристики, а по суммарным изображениям лучших классов частиц произведена оценка параметров спирали вируса. На основании полученных классов рассчитаны первичные реконструкции и произведено их улучшение. В результате проведенной работы впервые получена и охарактеризована трехмерная карта электронной плотности вириона ВПТ.

Исследования поддержаны грантом РФФИ 16-34-50185 мол_нр.

ИССЛЕДОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОАЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ С МОДЕЛЬНОЙ МЕМБРАНОЙ.

Морозов В.Н.[1], Новикова Н.Н. [2], Ковальчук М.В.[2], Якунин С.Н.[2], Рогачев А.В.[2,3], Шляпникова Е.А.[1], Канев И.Л.[1], Шляпников Ю.М.[1]

[1] Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ

e-mail: a.v.rogachev@yandex.ru

В последнее время стремительно растет интерес к лекарственным препаратам на основе субмикронных и наночастиц. Применение наноаэрозолей для лечения легочных заболеваний позволяет существенно снизить рабочую дозу лекарства по сравнению с пероральным введением. В то же время опубликованные данные о повреждениях в легких мышей уже после 20-минутного вдыхания наноаэрозолей свидетельствуют о присущих только наноаэрозольным частицам специфических биологических эффектах, которые требуют детальных исследований. Изучение взаимодействия наноаэрозольных частиц (НАЧ) с клеточной мембраной создает основу для разработки новых средств доставки, а также для понимания механизмов токсичности природных и антропогенных наноаэрозолей.

Представленные исследования посвящены выявлению факторов, контролирующих поведение НАЧ на поверхности липидного монослоя в условиях, моделирующих физиологические (периодические растяжения легкого, колебания влажности и т.п.). Измерения были проведены на станции Ленгмюр Курчатовского источника синхротронного излучения. Для генерации сильно заряженных НАЧ было использовано разработанное в ИТЭБ устройство, способное генерировать заряженные НАЧ размером 6-200 нм из суспензий и растворов нелетучих органических веществ. Наноаэрозоль наносили на липидный монослой (DPPC), сформированный на поверхности жидкости. Для изучения взаимодействия НАЧ с липидным монослоем были использованы поверхностно-чувствительные рентгеновские методы (стоячие рентгеновские волны и двумерная дифракция), что позволило in-situ изучать процессы транспорта частиц сквозь модельную липидную мембрану, а также наблюдать за структурными изменениями в монослое.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 15-29-01180 и № 16-32-00625)

СТРУКТУРА ВОДНЫХ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ ШПИНЕЛЕЙ ФЕРРИТА ПО ДАННЫМ МУРН

Нагорный А.В.[1,2], Петренко В.И.[1,2], Авдеев М.В.[1], Иваньков А.И.[1], Булавин Л.А.[2], Белоус А.Г.[3], Еленич А.В.[3], Солопан С.А.[3]

[1] Лаборатория нейтронной физики им. И.М.Франка, ОИЯИ

[2] Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко

[3] Институт общей и неорганической химии им. В.И. Вернадского НАНУ

e-mail: avnagorny@jinr.ru

Исследования коллоидных систем, состоящих из магнитных наночастиц, диспергированных в жидкую среду, - магнитных жидкостей, составляют особое направление в современной науке благодаря возможности применения магнитных частиц в широком спектре технических приложений и медицине.

Создание новых магнитных жидкостей с заданными свойствами для биомедицинских целей предполагает развитие новых методов синтеза магнитных наночастиц. Основное требование к феррожидкости в этом случае состоит в биосовместимости жидкости, на основе которой изготовлен коллоид. По этой причине в качестве поверхностно-активного вещества для стабилизации магнитных частиц используется Полисорбат-80 (твин-80, C64H26O124). Вместе с выполнением требований биосовместимости феррожидкостей, также желательно иметь возможность наперёд задавать свойства получаемых частиц, как например размеры, форму, свойства, связанные с управлением эффективностью нагревания при помещении магнитных частиц в переменном электромагнитном поле. Контролировать свойства магнитных частиц можно с помощью подбора материала из которого состоят наночастицы, например, окутать магнитное ядро менее магнитным материалом. В настоящей работе предпринимаются попытки зафиксировать наличие CoFe2O4-оболочки вокруг Fe3O4-ядра при помощи прямого метода наблюдения структуры в данном масштабе – малоуглового рассеяния нейтронов. Данные, полученные из одного источника требуют дополнительного сравнения, для этих целей параллельно рассматриваются магнитные жидкости, приготовленные на основе наночастиц магнетита и кобальт-феррита с аналогичной стабилизацией. Анализ данных малоуглового рассеяния нейтронов проводится в рамках подхода по вариации нейтронного контраста.

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ R-СЕЛЕКТИВНЫХ АМИНОТРАНСФЕРАЗ ИЗ ЭКСТРЕМОФИЛЬНЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ

Николаева А.Ю.[1], Бойко К.М.[1,2], Диброва Д.В.[3], Ракитина Т.В.[1], Безсуднова Е.Ю.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский Институт»

[2] Институт Биохимии им. Баха, ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

[3] МГУ имени М.В.Ломоносова

Nikolaeva_AY@nrcki.ru

R-селективные трансаминазы являются перспективными биокатализаторами стереоселективного аминирования кетонов для получения оптически чистых R-аминов, являющихся строительными блоками в синтезе ряда фармпрепаратов. Биотехнологически значимой оказывается идентификация таких ферментов в геномах экстремофильных микроорганизмов, поскольку, в ряде случаев, такие ферменты обладают улучшенными операционными свойствами, такими как высокая термостабильность, устойчивость к органическим растворителям и т.д. К настоящему моменту охарактеризован лишь небольшой ряд R-селективных трансаминаз. Недостаток данных в этой области определяет повышенный интерес к исследованию ферментов данного класса.

Нами проводится работа по структурно-функциональной характеристике новых BCAT-аминотрансфераз из экстремофильных микроорганизмов, способных осуществлять стереоселективный синтез R-аминов. В нашей лаборатории был проведен биоинформатический анализ, результатом которого являлась идентификация новых потенциальных R-селективных аминотрансфераз в геномах экстремофильных бактерий и архей. Нами были отобраны 4 целевых гена, рекомбинантные ферменты были экспрессированы в клетках E. coli, очищены и функционально охарактеризованы с целью определения pH-и температурного оптимума реакции трасаминирования, а также субстратной специфичности и R- селективности. Все исследуемых ферменты были закристаллизованы, для двух из них методом рентгено-структурного анализа получены пространственные структуры. На основе анализа полученных данных планируется проведение направленной модификации аминотрансфераз с целью разработки новых биокатализаторов с улучшенными операционными свойствами.

МЕХАНИЗМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ВЛИЯНИЯ АЛЦИАНОВОГО СИНЕГО КРАСИТЕЛЯ НА СТРУКТУРУ ОКРАШИВАЕМОГО БИОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА (МОДЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ)

Новакова А.А., Балуян Т.Г., Манджиева Ю.Б.,
Махаева Е.Е., Богдашкина Д.В.
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет

Алциановый синий краситель (АЦС) широко применяется в гистологии и при томографии засчет того, что способность окрашивать ткани для этого красителя зависит от кислотности среды, однако механизм его взаимодействия с биологическими тканями до сих пор не вполне изучен. Гель Поли-N-изопропилакриламида (ПНИПА) испытывает объемный фазовый переход при температуре 32°C и является полиэлектролитным гелем. Это делает данный гель подходящей моделью для изучения взаимодействия красителей с биологическими тканями, так как белки и нуклеиновые кислоты – важнейшие биополимеры – являются полиэлектрлитами [1]. В данной работе ставился модельный эксперимент по исследованию взаимодействия микрогеля ПНИПА и ацлианового синего красителя.

Исследование проводилось методами оптической микроскопии на микроскопе Keyence VHX-5000, сканирующей элекронной микроскопии на электронном микроскопе Quanta FEG FEI 600, снабженном специальной охлаждающей камерой и рентгендифракционного анализа на дифрактометре Empyrean PANanalytical. В данной работе исследовалось взаимодействие АЦС с микрогелями ПНИПА с 0 и 10% дополнительных заряженных звеньев метакрилата натрия

Молекулы АЦС - плоские, с большим количеством ароматических кольцевых элементов. Такая структура склонна к стэкинг-взамодействию [2], которое приводит к укладыванию молекул в «стопки», образующие нити. Исследование особенностей стэкинг-взаимодействия при взаимодействии АЦС с гелями ПНИПА осуществлялось помощью программы VESTA [3], позволяющей визуализировать атомарную структуру молекул и их соединение с учетом стэкинг-взаимодействия.

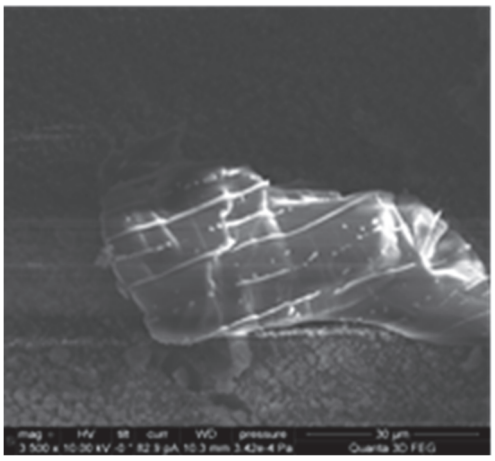


Рис.1 Электронная микроскопия частицы микрогеля ПНИПА, белые полосы – нити АЦС

Электронная микроскопия показала [Рис.1], что молекулы АЦС при взаимодействии с микрогелем ПНИПА с 10% мономеров метакрилата натрия образуют параллельные нитевидные структуры толщиной 1мкм, которые структурируют частицы микрогеля. Этот процесс приводит к существенному укрупнению размеров частиц микрогеля. В отсутсвие дополнительных заряженных звеньев метакрили натрия, АЦС выступает в роли дополнительного сшивателя, не образует нитевидные структуры и приводит к тому, что микрогель сшивается в макросетку.

[1] Богдашкина Д.В., Махаева Е.Е., Хохлов А.Р. “Поведение термочувствительных полиэлектролитных гидрогелей N-изопропилакриламида в водных растворах алцианового синего” // Высокомолекулярные соединения. Серия А, 2015, том 57, № 6. С. 533-543

[2] Джонатан Дж. Стид, Джерри Л. Этвуд. “Супрамолекулярная химия. Пер. с англ.: в 2т.”, 2007, том 1, С. 55-57

[3] Jp-minerals.org/vesta/en/

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ С-КОНЦЕВОГО ФРАГМЕНТА КАЛИЕВОГО КАНАЛА KV10.2 ЧЕЛОВЕКА

Новоселецкий В.Н., Волынцева А.Д., Соколова О.С.,
Шайтан К.В.
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, биологический факультет
e-mail: valeryns@gmail.com

Потенциал-управляемые калиевые каналы Kv10.2 экспрессируются в нервной системе и их мутантные варианты вовлечены в развитие эпилептической энцефалопатии и аутических симптомов [1], а также в появление и развитие опухолей [2]. Знание пространственной структуры канала и деталей ее организации способствует пониманию механизмов функционирования канала. Целью нашей работы является улучшение ранее полученных моделей этого канала [3, 4] с применением методов моделирования по гомологии и молекулярной динамики. До недавнего времени было доступно несколько шаблонов, в том числе комплекс eag-домена с доменом CNBHD для мышиного канала (pdb-код 4LLO), полноразмерная структура калиевого канала Kv1.2 (pdb-код 3LUT) и другие. В то же время, совсем недавно методом одночастичной криоэлектронной микроскопии была получена структура близкородственного канала Kv10.1 в хорошем разрешении (pdb-код 5K7L) [5], которая прояснила и многие вопросы касательно структуры канала Kv10.2. Однако структура С-концевого фрагмента по-прежнему остается неопределенной. Моделирование на основе дальнеродственных шаблонов позволило получить модель структуры этого фрагмента, которая представляет значительный интерес.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (грант №14.616.21.0044 от 09.10.2015, проект RFMEFI61615X0044).

[1] Yang Y, Vasylyev D.V. и др.// J Neurosci., 2013, том 33, № 42, с 16586-93.

[2] Camacho J. // Cancer Lett., 2006, том 233, № 1, с 1-9.

[3] Ju M., Wray D. // Biochemical and Biophysical Research Communications, 2006, том 342, с 1088–1097

[4] Соколова О.С., Шайтан К.В. и др. // БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ, 2012, том 38, № 2, с. 177–184

[5] Whicher J.R., MacKinnon R. // Science, 2016, том 353, № 6300, с. 664-669

ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЫ ДНК, ЛОКАЛИЗОВАННОЙ В ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ НАНОПОРЕ, И ДЕТЕКТИРОВАНИЕ СИГНАЛОВ ОТДЕЛЬНЫХ НУКЛЕОТИДОВ ПРИ СЕКВЕНИРОВАНИИ

Носик В.Л., Рудакова Е.Б.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: rudakova.kate@yandex.ru

Известно, что развитие прямых методов определения последовательности оснований молекулы ДНК (например, метод Сэнгера) сталкивается с многочисленными технологическими проблемами, что делает актуальной задачу разработки принципиально новых подходов, которые при меньшей стоимости были бы более эффективными [1]. Одними из наиболее перспективных «физических» подходов к секвенированию являются методы, основанные на использовании нанопор, сквозь которые биомолекула в ионном растворе проходит под влиянием приложенного электрического поля [2]. При этом нанопора обеспечивает пространственную локализацию молекул и позволяет осуществить детектирование сигнала (электрического, флуоресцентного и т.д.) от отдельного нуклеотида. В связи с вводом в строй новых импульсных источников рентгеновского излучения исследования флуоресцентного сигнала от одиночных молекул становятся технически осуществимыми.

На первом этапе требуется создание теоретической модели, описывающей процесс транслокации молекулы ДНК сквозь синтетическую нанопору. Для описания динамики полимера используется уравнение Ланжевена [3].

Второй этап эксперимента – считывание флуоресцентных сигналов отдельных оснований, локализованных в нанопоре. Флуоресцентное излучение возникает вследствие облучения молекулы внешним излучением высокой интенсивности с временной структурой (синхротрон, лазер на свободных электронах). Согласование скорости транслокации и периодичности рентгеновского импульса обеспечивает возможность динамического секвенирования.

[1] C. P. Fredlake et al // Electrophoresis, 2006, v 27, p 3689.

[2] M. Fyta, S. Melchionna, S. Succi // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics, 2011, v 49, p 985.

[3] K. Luo et al // Physical Review Letters, 2007, v 99, p 148102.

УРОВЕНЬ ЦИТОКИНОВ ПРИ МИАЛГИЧЕСКОГОМ ЭНЦЕФАЛОМИЕЛИТЕ, АССОЦИИРОВАННОМ С ГЕРПЕСВИРУСНОЙ ИНФЕКЦИЕЙ

Огурцов Д.П.[1,2], Дидковский Н.А.[2], Малашенкова И.К.[1], Крынский С.А.[1,2], Хайлов Н.А.[1], Гурская О.Г.[2], Жарова М.А.[2], Зуйков И.А.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский Институт»

[2] ФГБУ «ФНКЦ физико-химической медицины ФМБА России»

e-mail: daddy_pty-klo@mail.ru

Изучали количественную вирусную нагрузку (вирус Эпштейна-Барр EBV, герпесвирус человека 6 типа HHV-6) в слюне и уровень цитокинов (IFNγ, IL-2, IL-15, IL-1β) в крови у 53 больных миалгическим энцефаломиелитом (МЭ) (30 муж., 23 жен., 34±5 лет). Контролем служили 30 условно здоровых добровольцев. Критерием высокой репликации EBV в слюне был уровень ДНК вируса более 4 lg копий/мл.

Больные МЭ имели высокую степень репликации EBV в слюне в 41.5% случаев, в то время как в контрольной группе в 10% случаев. Высокая репликация EBV у больных ассоциировалась с увеличением частоты микст-инфекции вирусами EBV и HHV-6: она отмечалась у 54.5% больных МЭ/СХУ с низкой репликацией EBV и у 77.2% больных с высокой.

Высокий уровень EBV в слюне у больных МЭ ассоциировался со снижением уровня Th1-цитокинов в сыворотке. Так, уровень цитокина IFNγ был 203.85±91.14 пг/мл при низкой репликации вируса и 69.07±41.35 пг/мл при высокой (p=0.006). Уровень IL-2 был 3.26±1.66 пг/мл и 1.39±0.86 пг/мл (p=0.03). Кроме того, у больных была отрицательная корреляция между уровнем Tx1-цитокинов и числом копий EBV в слюне.

Ассоциаций между репликацией вируса HHV-6 и исследованными показателями иммунитета не было обнаружено.

Таким образом, у больных МЭ повышена частота активной герпесвирусной моно- и микст- инфекции с выделением EBV и HHV-6 в слюне. Обнаружена связь концентрации вируса EBV в слюне с уровнем Tx1-цитокинов. Она может говорить о недостаточности Tx1-ответа, описанной при других формах EBV-инфекции. Необходимы структурные исследования белков вируса EBV (vIL-10, EBNA-2) для изучения механизмов иммуносупрессивного действия вируса.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ В ОФТАЛЬМОЛОГИИ

Оразалиева А.М., Реджепова А.С., Бердыев Б.Б., Церетели Э.К., Тойкулиев Т.Г., Овезова А.А., Гулова Г.К.
Научно-клинический центр Государственного медицинского университета Туркменистана
e-mail:cool_msdoc@yandex.ru

Цель. Изучить возможность применения кристаллографического метода исследования при офтальмопатологии.

Туркменские офтальмологи кристаллографией (КГр) занимаются с 1973 г. [1]. С помощью метода выявлена возрастная динамика формирования кристаллической структуры слёзной жидкости (СЖ): от мелких кустистых кристаллов до папоротниковидных. При инфекционно-воспалительных процессах глаза характер изменений кристаллической структуры слезы и степень её разрушения зависели от возбудителя и сроков воспаления. Нормализация кристаллограмм (КГм) СЖ наступала после клинического выздоровления на 5-10 сут при бактериальной, на 10-20 сут - при вирусной инфекции.

КГр слезы у детей с доброкачественными опухолями не выявила существенных изменений в кристаллической структуре. При ретинобластоме (РБ) в КГм СЖ и камерной влаги отмечалась полная деформация основной структуры. П/о период при удалении РБ отличался длительным сроком нормализации кристаллической структуры слезы.

Кристаллографические исследования слёзного секрета при прободных ранениях глаза показали качественное различие КГм, отражающих степень тяжести травматического повреждения и характер развития посттравматического раневого процесса. В тяжёлых случаях в КГм раненого и парного здорового глаза насчитывалось до 8-10 разновидностей нарушений с новообразованными кристаллами. КГр СЖ чётко отражала степень тяжести при травматических гнойных язвах роговицы и эндофтальмитах, где КГр была полностью разрушена до сплошного конгломерата. Контрольное обследование больных через 1-3 мес после проведенного лечения показало, что развитию посттравматических осложнений предшествовали низкие показатели восстановления КГм обоих глаз с усилением деформации кристаллической структуры слезы к моменту проведения контрольных анализов.

КГр СЖ позволяет выявить характерную картину при различных заболеваниях глаза.

[1] Рапис Е.Г.//Всесоюзный съезд офтальмологов, Киев, 1973, с 56-57.

СТРУКТУРНЫЕ ДОМЕНЫ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СУБЪЕДИНИЦЫ ТЕЛОМЕРАЗЫ В КАЧЕСТВЕ МОДЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ ДЛЯ XFEL ЭКСПЕРИМЕНТА

Петрова О.А.[1], Родина Е.В.[2], Зверева М.Э.[2], Донцова О.А.[1,2]
[1] НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, МГУ имени М.В. Ломоносова
[2] Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail: alpinolen@mail.ru

Теломераза представляет собой обратную транскриптазу, которая участвует в поддержании стабильности генома, синтезируя повторяющиеся теломерные последовательности на концах эукариотических хромосом. Теломеразная активность детектируется в стволовых, половых и зародышевых клетках, однако в норме отсутствует в большинстве соматических клеток. Активация теломеразы обеспечивает неограниченное деление клеток в 80% типов раковых образований. Структурная характеристика теломеразы и ее компонентов необходима для направленного дизайна потенциальных антираковых препаратов.

Основными компонентами теломеразного комплекса являются каталитическая субъединица (TERT) и теломеразная РНК (TR). В последовательность TERT входят N-концевой, РНК-связывающий, каталитический и С-концевой домены. TR включает в себя матричную часть, комплементарную последовательности теломерного повтора, псевдоузел, элементы TWJ и TBE и Est1-связывающую шпильку.

Белки, соответствующие доменам TERT дрожжей Ogataea polymorpha, предложены в качестве модельных объектов для структурных исследований, в том числе с использованием XFEL-технологии. В ходе данной работы был получен белок, соответствующий opTERT без N-концевого участка, однако содержащий все остальные домены. Была создана система для ко-экспрессии укороченной opTERT с фрагментами opTR. Ко-экспрессия позволяет увеличить выход целевого белка и его структурированность. Полученные нуклеопротеиды имитируют минимальный структурный теломеразный кор и могут быть использованы для дальнейших исследований.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант 15-54-74005) и Минобрнауки (лот 2014-14-588-0001).

ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АТОМОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ XFEL-ИМПУЛЬСА НА КАРТИНУ ДИФРАКЦИИ, РЕГИСТРИРУЕМУЮ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ МАКРОМОЛЕКУЛ

Петрова Т.Е.[1], Лунин В.Ю.[1], Грум-Гржимайло А.Н.[2], Грызлова Е.В.[2], Синицын Д.О.[3], Лунина Н.Л.[1], Балабаев Н.К.[1], Терешкина К.Б.[3], Степанов А.С.[3], Крупянский Ю.Ф.[3]

[1] Институт математических проблем биологии РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

[2] Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова

[3] Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

e-mail: tania.petrova.ru@gmail.com

Мощные импульсы рентгеновских лазеров могут вызывать значительные изменения электронной структуры атомов за время, сопоставимое с длительностью одного импульса. Методами численного моделирования изучено влияние этих изменений на интенсивности рассеянных лучей, регистрируемые в дифракционном эксперименте при исследовании биомакромолекул. Эволюция электронных конфигураций атомов определялась на основе решения скоростных уравнений, с не зависящими от времени скоростями переходов Оже и флюоресценции и меняющейся во времени скоростью фотоионизации. Показано, что при плотности потока фотонов до 10^4 фотонов на Å^2 за импульс (что является верхним пределом для используемых в настоящий момент лазеров) влияние нестационарности несущественно. Однако ситуация меняется при возрастании плотности потока фотонов до 10^6 и выше, требуя введения поправок на нестационарность в расчет теоретической картины дифракции. Предложен алгоритм расчета теоретической картины нестационарной дифракции, сравнимый по вычислительной сложности с расчетом картины стационарной дифракции [1].

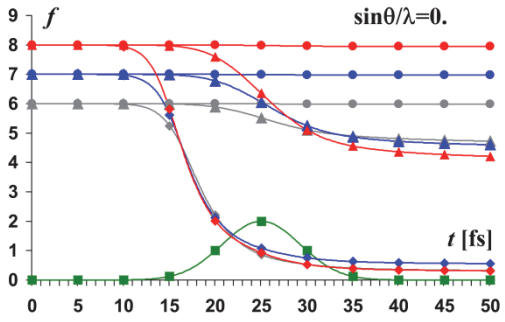


Рис.1. Изменение во времени среднего числа рассеивающих электронов для атомов C (серый), N (голубой) и O(красный) при плотности потока фотонов 10^4, 10^6 и 10^8 фотонов/Å^2 за импульс (круги, треугольники и квадраты соответственно). Профиль импульса показан зеленым цветом.

[1] Lunin V.Y., Grum-Grzhimailo A.N.et al. // Acta Cryst. D, 2015, v 71, p 293-303.

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА DendFP (ИЗ *Dendronephthya sp.)* В ЗЕЛЁНОЙ И ФОТОКОНВЕРТИРОВАННОЙ КРАСНОЙ ФОРМАХ.

Плетнева Н.В., Артемьев И.В., Горячева Е.А., Пахомов А.А., Мартынов В.И., Плетнев В.З.

ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук (ИБХ РАН),

e-mail: nadand@mail.ru

Флуоресцентные белки (ФБ) нашли широкое применение в качестве эффективных молекулярных инструментов для визуализации и мониторинга внутренних процессов в клетках и целых организмах. Конструирование новых биомаркеров с улучшенными характеристиками в значительной степени обязано рентгеноструктурным исследованиям, которые дают ценную информацию о взаимосвязи между структурой и свойствами.

Фотопереключаемый флуоресцентный белок wt DendFP (из коралла *Dendronephthya* sp., с хромофоробразующей последовательностью His62-Tyr63-Gly64) при облучении УФ светом (~380 нм) проявляет необратимое превращение из зеленой (Lвозб=486 нм и Lэм=506 нм) в красную (Lвозб=558 нм и Lэм=575 нм) форму. Он принадлежит к Kaede группе необратимо фотоконвертируемых белков. DendFP демонстрирует хороший фотоконверсионный контраст, высокие фотостабильность и скорость созревания хромофора. Данный биомаркер показал высокую эффективность при изучении миграции внутриклеточных белков. Возникающий при фотопереключении сдвиг флуоресценции в красную область спектра является особо ценным свойством для его практического применения в связи с повышенной проницаемостью соответствующего излучения через биологические ткани.

Методом рентгеноструктурного анализа установлена структура фотоконвертируемого флуоресцентного белка DendFP (*Dendronephthya sp.*) в зеленой и фотоконвертированной красной формах при разрешении 1.81Å и 2.14Å, соответственно.

DendFP в зеленой и красной формах кристаллизуется в пространственной группе P1 с четырьмя и двумя тетрамерами, соответственно.

Структура мономера DendFP представляет собой β-бочонок, сформированный из 11 антипараллельных β-сегментов и одной центральной α-спирали, содержащей хромофор. Хромофор зеленого DendFP принимает планарную бициклическую структуру, состоящую из пятичленного имидазолинонового и шестичленного фенольного циклов. Показано, что фотоконверсия DendFP в красную форму сопровождается разрывом основной цепи по связи C^{α}–N первого остатка хромофора с образованием концевой карбоксамидной группы у предшествующего остатка Leu61. Образующаяся в процессе окисления связь Cα=Cβ боковой цепи His62 хромофора расширяет сопряженную пи-электронную систему хромофора за счет имидазольного цикла. Процесс

сопровождается сдвигом флуоресценции из зеленой в красную область спектра.

На основе рентгеноструктурных данных и последующего мутагенеза установлена взаимосвязь между пространственной организацией и фотофизическими характеристиками.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ОЛИГОМЕРОВ БЕЛКА ЛИЗОЦИМА В РАСТВОРАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Подшивалов Д.Д., Благов А.Е., Дьякова Ю.А., Марченкова М.А., Писаревский Ю.В., Тимофеев В.И., Ковальчук М.В.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: david.podshivalov@mail.ru

Острой проблемой в современной белковой кристаллографии является поиск условий кристаллизации. На сегодняшний день определение этих условий производится трудоемким методом проб и ошибок.

В [1] было предложено в качестве критерия использовать появление олигомеров, составляющих элементы структуры и белка и это предположение было экспериментально подтверждено на примере исследования условий кристаллизации тетрагональной фазы белка лизоцима. Был определено, что в растворе при условиях благоприятных для кристаллизации образуются димеры и октамеры лизоцима. При этом из анализа структуры тетрагонального лизоцима было выделено два типа октамеров А (объем 140нм3) и Б (объем 119нм3), которые могут служить элементарными единицами при росте кристаллов. Точность проведенных в [1] измерений не позволила определить какой из октамеров образуется. Остался также неясным вопрос почему не проявились тетрамеры, которые могут являться промежуточной стадией при образовании октамеров из мономеров помимо димеров.

В настоящей работе было проведено моделирование поведения димеров, тетрамеров и октамеров лизоцима в растворах методом молекулярной динамики. Подготовка трехмерной структуры и моделирования использовалось поле AMBERFF99 и программный пакет Gromacs [2].

Структуры были подготовлены для виртуального эксперимента для двух температур – 10 и 35 ºС в присутствие или отсутствии осадителя. Получены и проанализированы трехмерные траектории движения атомов комплексов.

Результаты показали, что димер А менее стабилен, чем димер В, однако, тетрамера А оказался стабильнее тетрамера В. Оба тетрамера существенно менее стабильны чем димеры. Было показано, что октамер А является самой стабильной из трех структурой, а октамер В нестабилен при любых условиях.

Таким образом, результаты проведенных расчетов показывают, что наиболее вероятной единицей роста лизоцима тетрагональной модификации является октамер типа А.

[1] М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, Ю. А. Дьякова и др.// Crystal Growth&Design, 2016, том 16, с 1792−1797.

[2] D. Van Der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, и др.// J Comput Chem. 2005. Т. 26. № 16. — С. 1701-18.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ФОСФОПАНТЕТЕИН АДЕНИЛИЛТРАНСФЕРАЗЫ ИЗ MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Подшивалов Д.Д., Тимофеев В.И., Куранова И.П.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: david.podshivalov@mail.ru

В данной работе в качестве мишени для поиска новых специфических ингибиторов была выбрана фосфопантетеин аденилилтрансфераза из *Mycobacterium tuberculosis* (PPAT Mt). Этот белок участвует в пятистадийном синтезе кофермента А (CoA), катализируя предпоследнюю стадию этого процесса — синтез дефосфокофермента А (dPCoA) из 4'-фосфопантетеина и молекулы АТФ. Эта стадия ключевая, потому что на ней регулируется количество конечного продукта всего синтеза – CoA, ингибитора для данной реакции. Известно, что бактерия *Mycobacterium tuberculosis* быстро адаптируется к антитуберкулезным препаратам. Поэтому конструирование противотуберкулезных лекарств является важной задачей.

Для поиска потенциальных ингибиторов использовался метод виртуального скрининга, реализованный в интернет-сервисе Mcule и данные о трехмерной структуре PPAT Mt в апо-форме (PDB ID: 4E1A). Полученный набор лигандов был ранжирован по данным оценочной функции докинга, были отобраны четыре наиболее перспективных лиганда, удовлетворяющие правилам Липински. Положение лигандов уточнено методом молекулярной динамики с применением программного пакета GROMACS и суперкомпьютера “Ломоносов” [1]. Установлено положение связанных лигандов и проанализировано их ближайшее окружение. Показано, что исследованные соединения непосредственно взаимодействуют с функционально важными аминокислотными остатками активного центра, благодаря чему могут быть использованы для разработки на их основе селективных ингибиторов PPAT Mt – потенциальных антитуберкулёзных лекарственных препаратов.

Работа выполнены при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение о предоставлении субсидии 14.616.21.0071, RFMEFI61616X0071).

[1] Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И. и др. Практика суперкомпьютера «Ломоносов» // Открытые системы. - Москва: Издательский дом «Открытые системы», N 7, 2012. С. 36-39.

ДЕТЕКЦИЯ СВЯЗАННОГО ГЛУТАТИОНА В СТРУКТУРЕ NA,K-АТФАЗЫ

Полуэктов Ю.М., Митькевич В.А., Петрушанко И.Ю., Бурнышева К.М., Лакунина В.А., Анашкина А.А., Макаров А.А.

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта, РАН

e-mail: irina-pva@mail.ru

Na,K-АТФаза – мембранный фермент, создающий градиент Na^+ и K^+ за счет гидролиза АТФ. Нами было показано, что α-субъединица Na,K-АТФазы подвергается базальному и регуляторному глутатионилированию. Регуляторное глутатионилирование играет важную роль в редокс-регуляции активности Na,K-АТФазы. Базальное глутатионилирование не меняется в процессе функционирования белка и может быть снято только с денатурированного белка. Длительное пребывание клеток в условиях гипоксии приводит к возрастанию уровня базального глутатионилирования вновь синтезируемого белка. Целью работы был анализ структур Na,K-АТФазы для выявления участков базального глутатионилирования.

В структурах Na,K-АТФазы с разрешением менее 4 Å были обнаружены изолированные полости, содержащие неразрешенную электронную плотность, соответствующую по конфигурации и объему молекуле глутатиона. Неразрешенная плотность была обнаружена у остатков цистеина 204, 242; 367, 698; 452, 456, 457 и 599, часть из которых расположена парами, однако анализ структур с помощью программы DSSP показал отсутствие каких-либо дисульфидных связей между ними. Были получены модели, в которых молекула глутатиона с помощью экспертного моделирования была вписана в неразрешенную электронную плотность и проведена локальная минимизация полученных структур в программе MOE 2009. Анализ моделей в программе COOT показал, что молекула глутатиона не выходит за пределы плотности. Полученные данные свидетельствуют, что структура α-субъединицы Na,K-АТФазы содержит полости, в которых располагаются молекулы глутатиона, не детектируемые при стандартном решении кристаллических структур белков.

Поддержано грантом РНФ №14-14-01152.

Mitkevich V., Petrushanko I. et al. // Ox. Med. Cel. Longev. 2016, doi:10.1155/2016/9092328.

ЭКСТРЕМАЛЬНАЯ БИОМИНЕРАЛИЗАЦИЯ В АРКТИКЕ

Рейхард Л.Е., Дара О.М., Сапожников Ф.В., Калинина О.Ю.

Институт океанологии им. П.П. Ширшова РАН

e-mail: mollusc@mail.ru

Биоминерализация бывает двух типов: биологически контролируемая (BCM) и биологически индуцируемая (BIM) [1, 2]. Особый интерес представляют минералы, образованные живыми организмами, чья жизнедеятельность осуществляется в экстремальных условиях Арктики (низкие температуры, зоны с высокой концентрацией сероводорода и метана). В ходе комплексных исследований удалось изучить проявления биоминерализации в водной толще, ледовом покрове и донных осадках Северного Ледовитого океана (СЛО), а также оценить ее влияние на процессы седименто- и диагенеза в осадочных бассейнах арктической зоны. Исследования проводились на протяжении последних 15 лет в различных районах шельфовых арктических морей (Белом, Баренцевом, Карском и Лаптевых), а также в приполюсном районе СЛО. Выявлено, что BCM проявлена в образовании: а) кальцита панцирей кокколитофорид, раковин фораминифер и моллюсков; в) арагонита раковин моллюсков; б) опала панцирей диатомовых водорослей, скелетов силикофлагеллат (рис.1а), стоматоцист золотистых водорослей, спикул кремневых губок. В процессе BIM с участием бактерий в Арктике образуются: а) гидроокислы железа и марганца (в том числе, железомарганцевые конкреции), б) фрамбоидальный пирит; в) вивианит (рис.1б); г) сидерит; д) магнезиальный кальцит.

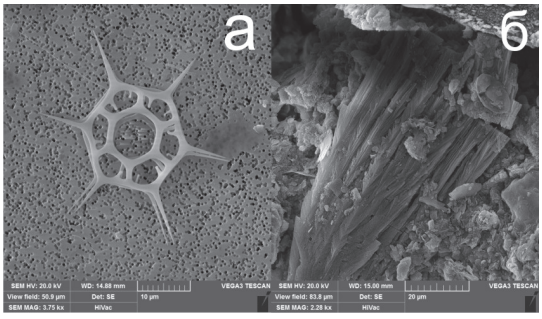


Рис.1. Биоминералы в Арктике

Авторы выражают благодарность академику Лисицыну А.П., Писареву С.В., Новигатскому А.Н., Новичковой Е.А., Беляеву Н.А., Кравчишиной М.Д., Карлову В.А., Боеву А.Г. за помощь в проведении исследований.

Исследования проводились в рамках Государственного задания ИО РАН на 2015–2017 гг. по теме № 0149–2014–0026. Интерпретация данных выполнена при поддержке РНФ (грант №14-50-00095).

[1] Lowenstam H A (1981) Minerals formed by organisms. Science 211:1126-1131

[2] Lowenstam H A, Weiner S (1989) On Biomineralization. Oxford University Press, New York

ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ НАНОДИСКОВ С ПОМОЩЬЮ ВАРИАЦИИ КОНТРАСТА В МАЛОУГЛОВОМ РЕНТГЕНОВСКОМ РАССЕЯНИИ

Рижиков Ю.Л.[1], Забельский Д.В.[1], Николаев М.Ю.[1,2], Горделий В.И.[1,3,4,5], Куклин А.И.[1,3]

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)

[2] Федеральная политехническая школа Лозанны

[3] Объединённый институт ядерных исследований

[4] Институт сложных систем, Юлихский исследовательский центр

[5] Институт структурной биологии

e-mail: rizhikov@phystech.edu

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) [1] представляет собой мощный метод структурных исследований биологических объектов, таких как белки, мембраны, макромолекулы и т.д.

В данной работе метод вариации контраста [2-3] был применён в МУРР экспериментах для получения информации о структуре фосфолипидных нанодисков - мембрано-имитирующих систем, состоящих из фрагмента липидного бислоя и двух мембранных каркасных белков (MSP) [4]. Нанодиски были приготовлены из липидов DMPC и белков MSP1E3D1.

Измерения МУРР проводились на установке BioSAXS BM29, синхротрон ESRF, Гренобль, Франция [5]. Были приготовлены растворы нанодисков в буферах с содержанием сахарозы 0, 80, 160, 240, 320 и 400 мг / мл.

Для каждой концентрации сахарозы были вычислены функции Паттерсона, радиусы инерции и интенсивности в нулевой угол. Наблюдалась нелинейная зависимость форм-фактора в нулевой угол от электронной плотности растворителя. Были выявлены изменения структуры нанодисков, находящихся в растворах, содержащих сахарозу.

С помощью аппроксимации концентрации сахарозы к нулевому значению были получены средняя электронная плотность, парциальный объём и электронный заряд нанодисков. Вычисленный объём эквивалентен объёму цилиндра с высотой 35 Å и диаметром 120 Å. Полученное количество электронов в нанодисках имеет близкое значение к количеству электронов, вычисленному для стехиометрического соотношения MSP1E3D1/DMPC = 1/160 [4].

Было показано, что электронный заряд нанодисков, а также, возможно, их объём, уменьшаются при увеличении концентрации сахарозы в растворе. Возможная причина явления заключается в уменьшении числа молекул воды, ассоциированных с липидным бислоем. В соответствии с этим объяснением, была получена зависимость минимально возможного числа таких водных молекул от концентрации сахарозы в растворе.

Работа проводилась при поддержке 5-100 проекта повышения конкурентоспособности МФТИ среди ведущих мировых научно-образовательных центров Министерства образования и науки Российской Федерации.

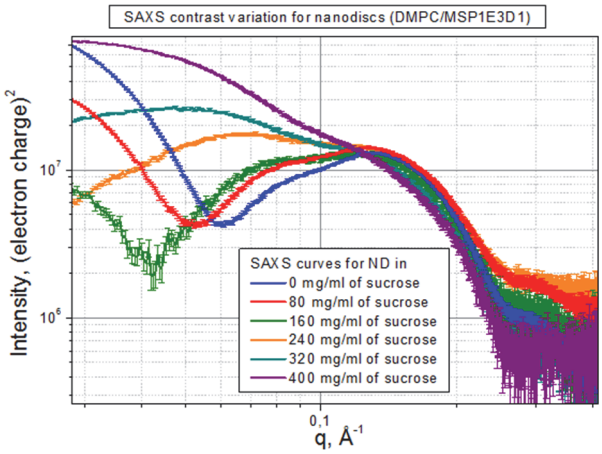


Рис.1. Кривые МУРР для растворов нанодисков в буферах с содержанием сахарозы 0, 80, 160, 240, 320 и 400 мг / мл.

[1] D.I. Svergun, L.A. Feigin, New York/London, 1987. XIII, 335 p.

[2] Yu.M. Ostanevich, I.N. Serdyuk, Usp. Fiz. Nauk (in Russian), 137, 85-116 (1982).

[3] H.B. Struhrmann, R. G. Kirste, Z. Phys. Chem. (*Francfurt am Main*), 46, 247-250 (1965).

[4] T.K. Ritchie, et al., Methods in Enzymology, 464, 211–231 (Chapter 11) (2009).

[5] P. Pernot, A. Round, R. Barrett, et al., J. Synchrotron Rad, vol. 20, pp. 660–664 (2013).

АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ БЕЛКОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рубин А.Б., Хрущев С.С., Дьяконова А.Н., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

ФГБВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», Биологический факультет

Важнейшие биологические функции в живой клетке осуществляются в процессе взаимодействия белковью Для понимания механизмов этих процессов необходимо знать атомарную пространственную структуру сложных биомакромолекул. В преобразовании световой энергии в энергию химических связей при фотосинтезе базовую роль играет электронный транспорт, важными этапами которого являются взаимодействия подвижных белков-переносчиков друг с другом и с встроенными в фотосинтетическую мембрану мультиферментными комплексами. Методами многочастичной броуновской и молекулярной динамики нами изучены процессы взаимодействия белков пластоцианина (Pc) с цитохромом f и фотосистемой 1 (ФС1), ФС 1 с ферредоксином (Fd) и флаводоксином, а также Fd с ферредоксин-NADF-редуктазой (ФНР). Процесс взаимодействия белков при образовании ими комплекса рассматривается на различных временных масштабах – от микро- и миллисекунд (времена диффузии белков в растворе – броуновская динамика) до долей пикосекунд (подвижность атомов – молекулярная динамика). Моделирование процессов переключения электронных

потоков от Fd, акцептирующего электроны от ФС 1, с пути синтеза сахаров с участием ФНР на путь выделения водорода с участием фермента гидрогеназы позволило прояснить физические механизмы регуляции этого процесса, рассматриваемого как возможный способ получения альтернативного источника энергии, и предложить способы повышения выхода биоводорода.

ПОЛУЧЕНИЕ, ВЫДЕЛЕНИЕ И ХАРАКТЕРИСТИКА РЕКОМБИНАНТНОГО МЕДЬ-СВЯЗЫВАЮЩЕГО БЕЛКА CopC ИЗ БАКТЕРИИ *THIOALKALIVIBRIO PARADOXUS* ARH1

Саплинов Е.Ю.[1], Цаллагов С.И.[1], Ракитина Т.В. [2], Осипов Е.М.[1], Дергоусова Н.И.[1], Тихонова Т.В.[1], Попов В.О.[1,2]

[1] Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

[2] Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»

e-mail: evgenysaplinov@gmail.com

Оперон *copABCD* отвечает за биосинтез белков, обеспечивающих связывание и транспорт ионов Cu(I)/Cu(II) у устойчивых к высоким концентрациям ионов меди бактерий *Pseudomonas syringae.* Известны два типа белков CopC. Хорошо охарактеризованный CopC типа A входит в состав оперона *copABCD* и имеет сайты связывания ионов Cu(I) и Cu(II). CopC типа B из бактерии *Pseudomonas fluorescens* содержит только сайт связывания Cu(II). Структура и функция этого белка неизвестны.

Объектом настоящего исследования является CopC типа B из бактерии *Thioalkalivibrio paradoxus*. Белок содержит 160 аминокислотных остатков, 30 из них – сигнальный пептид. Молекулярная масса зрелого белка 14 кДа. Гомология с известными CopC типа A и B не превышает 28 %.

В клетках *E.coli* получен рекомбинантный CopC без сигнального пептида с His_6-тагом на C-конце и сайтом расщепления для TEV-протеазы. В результате проведения двух стадий металлохелатной хроматографии, разделенных стадией обработки целевого белка TEV-протеазой, был получен гомогенный препарат CopC. Методом тушения триптофановой флуоресценции показано, что CopC связывает Cu(II) в соотношении 1:1. В растворе CopC присутствует в виде смеси димера и тетрамера с молекулярной массой около 28 и 46 кДа**.**

Получена пространственная структура CopC с разрешением 2.7 A. В кристалле CopC существует в виде димера. Сайты связывания ионов Cu(II) расположены на противоположных концах молекулы, строение сайтов связывания Cu(II) совпадает с таковым у CopC типа A. Лишь один сайт в димере содержит связанный ион меди.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-04-01818.

ТЕМПЕРАТУРНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЕМ БЕЛКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

Сафронов В.В., Кривоногова Н.В., Стрелов В.И.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: victor_safronov@yahoo.com

Для изучения пространственной структуры белков требуется получение структурно совершенных монокристаллов этих сложных биомакромолекул. Традиционно применяемые методы, самым распространенным из которых является метод диффузии паров, не обеспечивают единичных центров зародышеобразования. Это зачастую приводит к росту множественных кристаллов, исследование которых затруднено. Для получения единичных кристаллов можно воспользоваться методом изменяемого во времени температурного градиента.

Зародышеобразование может производиться при различных программах управления температурой. Классический способ предполагает максимально быструю установку температуры в точке кристаллизации с последующим ее поддержанием с высокой точностью вплоть до начала кристаллизации. Однако, как показали наши эксперименты, такой режим в большинстве случаев приводит к появлению множественных кристаллов, что нежелательно. Существенно лучших результатов, т.е. появления одного-двух кристаллов, удается достичь медленным снижением температуры с постоянной скоростью, что можно объяснить следующим образом. В кристаллизационной пробе существует некоторое количество потенциальных центров зародышеобразования с разными порогами необходимого пересыщения. Начало роста кристалла в одном из них приводит к снижению концентрации белка в его окрестности, что подавляет появление других зародышей. Для реализации этого метода требуется изменять температуру достаточно медленно для того, чтобы диффузионные и конвективные процессы успевали выравнивать концентрацию в области, где возможно зародышеобразование. Оптимальная скорость снижения температуры (0.1 С/ч) была подобрана эмпирически в результате ряда экспериментов по кристаллизации лизоцима. В большинстве кристаллизационных проб этим методом удалось добиться выращивания одного монокристалла.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРА D,L-ЛАКТИДА С ГЛИКОЛИДОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Седуш Н.Г., Демина В.А., Чвалун С.Н.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: Sedush_NG@nrcki.ru

Полимеры на основе лактида и гликолида (ПЛГА) - биосовместимые и биоразлагаемые полиэфиры, которые благодаря своим уникальным свойствам нашли широкое применение в медицине. Физико-химические свойства и сроки деградации этих материалов легко контролировать путем изменения молекулярной массы, химического состава полимера и его надмолекулярной структуры. В последнее десятилетие на основе полилактонов активно разрабатывают системы направленной доставки и пролонгированного высвобождения лекарств. Показано увеличение терапевтической эффективности препаратов на основе частиц ПЛГА по сравнению со свободными эквивалентами. За счет своих размеров и модифицированной поверхности наночастицы могут селективно накапливаться в больном органе или ткани, преодолевать гематоэнцефалический барьер. Одним из эффективных подходов, позволяющих получать наночастицы ПЛГА и нагружать их гидрофобными агентами, является соосаждение. Несмотря на большой интерес к этому методу, форма и структура наночастиц ПЛГА, получаемых с его помощью, изучена плохо.

Целью данной работы является разработка метода получения наночастиц ПЛГА, нагруженных противораковым агентом, и их комплексное исследование различными методами. Предложена методика получения наночастиц и проведена загрузка наночастиц противораковым агентом паклитакселом. Методами динамического светорассеяния, сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и малоуглового синхротронного рентгеновского рассеяния проведено исследование влияния относительного состава сополимера, типа стабилизатора и условий получения на размер и форму наночастиц. Показано, что варьируя условия, можно регулировать средний диаметр частиц в пределах 100 – 250 нм, а дзета-потенциал – от –10 до –20 мВ. Реконструкция формы частиц методом *ab initio* моделирования позволила установить, что частицы имеют форму, близкую к сферической.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ СУБСТРАТА АТФ И АЛЛОСТЕРИЧЕСКОГО ИНГИБИТОРА АДФ ФОСФОРИБОЗИЛПИРОФОСФАТ СИНТЕТАЗОЙ ИЗ E.COLI МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сидоров-Бирюков Д.Д.[1], Тимофеев В.И.[1,2], Куранова И.П.[1,2]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: sbdd@bk.ru

Фосфорибозилпирофосфат синтетаза (PRPPS) катализирует синтез 5-фосфорибозилпирофосфата (5-PRPP) посредством переноса β,γ-пирофосфатной группы АТФ на С1-гидроксильную группу рибозо-5-фосфата (R5P). Поскольку R5P вовлечен в ряд метаболических процессов, приводящих к биосинтезу нуклеотидов, коферментов и некоторых аминокислот, он принадлежит к метаболитам, постоянно востребованным клеткой, а PRPPS относится к необходимым для жизнедеятельности организма ферментам.

В данной работе методом молекулярного моделирования исследовано связывание субстрата АТФ в активном, и аллостерического ингибитора АДФ в регуляторном, центрах фермента в присутствии ионов Mg^{2+} и R5P. В качестве стартовых использовались координаты *E.Coli* PRPP синтетазы при разрешении 2.71 Å (PDB ID: 4S2U). Для включения в молекулу PRPPS перечисленных лигандов, первоначально использовали совмещение структуры *E.Coli* PRPPS со структурой комплекса гомологичного белка из *B. subtilis* (PDB ID: 1DKU) в комплексе с аналогами АТФ и АДФ. С использованием программы Coot аналоги АТФ и АДФ были заменены на субстрат (АТФ) и ингибитор (АДФ). Полученные координаты были уточнены методом молекулярной динамики. Была промоделирована траектория, составляющая 10 нс. Работа выполнена с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов федерального центра коллективного пользования в НИЦ «Курчатовский институт», http://computing.kiae.ru/.

Получены уточненные координаты АТФ и АДФ в активном и аллостерическом центрах молекулы фермента.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-22-01078 офи_м).

СТРУКТУРА МУТАНТНОЙ ФОРМЫ EGFP ДЛЯ ДИЗАЙНА ГИБРИДНЫХ БЕЛКОВ С МАТЮРИРОВАННЫМ ХРОМОФОРОМ.

Симановская А.А.[1], Ивашина Т.В.[2], Попов А.Н.[1], Крюкова М.В.[1]., Липкин А.В.[1], Качалова Г.С.[1]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2]ИБФМ РАН им. Г.К. Скрябина
e-mail: anna.eltsina@gmail.com

Задачей данной работы стала разработка флуоресцентного белка, фолдинг которого в химерных конструкциях увеличивает вероятность матюрации хромофора. независимо ни от порядка положения хромофора в химерной конструкции, ни от состава и длины линкера.

Результатом стало создание с помощью направленного мутагенеза нового варианта EGFP (mEGFP) с геномной последовательностью соответствующей мутантной форме EGFP с мутацией Leu232His.

Была создана конструкция новой мутантной формы EGFP, в которой в плазмиду pHis-p1 была вставлена геномная последовательность mEGFP. Рекомбинантный белок был проэкспрессирован, выделен из клеток и очищен по протоколам, разработанным ранее для получения EGFP. Проверка появления матюрации проводилась на химерных конструкциях EGFP с лизоцима и mEGFPc лизоцимом в UV лучах на SDS-гелях с образцами непрогретых клеточных проб гибридных белков, отбираемых после инициации экспрессии. Был проведен скрининг кристаллизационных условий с помощью кристаллизационных наборов компании Hampton Research, для mEGFP белка, сконцентрированного до 8мг/мл.

От выращенных кристаллов на станции ID23-1 (ESRF, Гренобль) был отснят набор дифракционных данных с разрешением 1.53Å. Кристаллы принадлежат пространственной группе C2 с параметрами ячейки a = 84.60Å b = 67.93Å, c = 47.27Å, β=118.66°. Структура была решена методом молекулярного замещения с использованием в качестве исходной модели решенной нами ранее структуры EGFP. Уточнение проведено с помощью программы REFMAC до R-fact=0.17 (R-fact free=0.21). Было продемонстрировано, что введенная мутация способствует стабилизации остатков β-цепи, принимающей участие в формировании хромофора, независимо от присутствия последующего линкерного участка и его состава.

ИНАКТИВАЦИЯ ARP2/3 КОМПЛЕКСА: АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ X-RAY, EM, MD

Соколова О.С.[1], Антонов М.Ю.[2], Попинако А.В.[3]
[1]Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова Биологический факультет
[2]Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова
[3]ФИЦ Биотехнологии РАН
e-mail: popinakoav@gmail.com

Arp2/3 комплекс играет ключевую роль в регуляции ветвления актиновых филаментов, что обуславливает его участие в процессе миграции клеток, цитокинезе. По данным исследований, неопластическая трансформация клеток часто сопряжена с изменениями актинового цитоскелета. В связи с этим, изучение механизма инактивации Arp2/3 комплекса является перспективным направлением. Было показано, что взаимодействие фактора созревания глии (GMF) с Arp2/3 комплексом останавливает образование сетей актина, инактивируя ветвление актиновых филаментов. Также методами электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа обнаружены 3 сайта связывания GMF с Arp2/3 комплексом, хотя стехиометрия связывания составляет 1:2. Для выяснения деталей инактивации был проведен структурно-динамический анализ взаимодействий Arp2/3 и GMF в различных сайтах связывания, были показаны изменения водородных связей между GMF и Arp2/3 комплексом в ходе динамики для всех сайтов связывания.

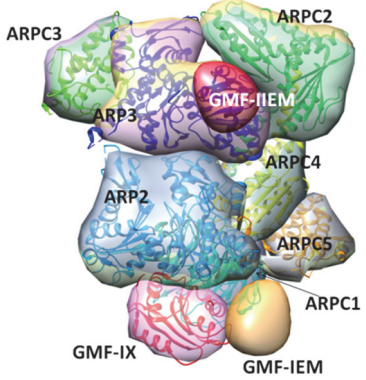


Рис.1. Структура Arp2/3 комплекса с GMF

Наибольшее число остатков, вовлеченных в гидрофобно-гидрофильные взаимодействия между Arp2/3 комплексом и GMF, обнаружено в сайте связывания GMF-IEM. Анализ траектории молекулярной динамики Arp2/3 и GMF в сайте связывания GMF-IX выявил уменьшение числа водородных связей между GMF и субъединицами Arp2, ARPC1. Также было показано смещение центра масс GMF по направлению к Arp2 субъединице. Анализ траекторий молекулярной динамики сайтов связывания GMF-IEM и GMF-IIEM выявил увеличение числа водородных связей между GMF и комплексом. Работа проведена при финансовой поддержке РФФИ, соглашение №16-34-60252 (разработка протокола), РНФ №14-14-00234 (анализ траекторий).

НЕКОВАЛЕНТНАЯ ИММОБИЛИЗАЦИЯ АНТИТЕЛ НА ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕЗИСТИВНЫХ БИОСЕНСОРОВ

Степанова Т.С.[1,2], Федоров Г.Е. [1,2], Гайдученко И.А. [2], Пресняков М.Ю.[2], Хайлов Н.А.[2], Малашенкова И.К.[2], Величковский Б.М.[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет),
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
email: tanja.stepanova36@gmail.com

В докладе представлены результаты работы по созданию проводящих структур на основе углеродных нанотрубок (УНТ). УНТ синтезированы CVD-методом на кремниевых и кварцевых подложках с различными вариантами нанесения катализаторов. Морфология и характеристики полученных пленок исследовались при помощи сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), атомно силовой микроскопии (АСМ) и Рамановской спектроскопии. Было установлено, что большинство УНТ, образующих синтезируемые пленки представляют собой одностенные УНТ с диаметром от 1.0 до 2.5 нм. Исследования транспортных характеристик показали, что сопротивление пленок составляет от 500 ом/квадрат.

Полученные УНТ-пленки планируется использовать как основу чувствительного элемента для биосенсорных устройств. В данной работе продемонстрирована универсальная схема нековалентной функционализации пленок из углеродных нанотрубок, позволяющей специфично связывать молекулы маркера (в данной работе использовались аденовирус и ротавирус) на поверхности углеродных нанотрубок. Универсальность схемы проявляется в том, что единственная стадия процедуры, определяемая исследуемым маркером – это нанесение антител. Кроме того, были установлены параметры процедуры синтеза материала на основе углеродных нанотрубок, позволяющие добиться максимальной сорбционной способности с помощью необходимого количества антител, иммобилизированных на поверхности из раствора с заданной концентрацией антител. Показано, что нековалентная функционализация приводит к заметно меньшему увеличению сопротивления пленок, чем ковалентная.

ПОИСК ИНГИБИТОРОВ ГИСТОНОПОДОБНОГО HU-БЕЛКА ИЗ *SPIROPLASMA MELLIFERUM.*

Талызина А.А.[1], Тимофеев В.И.[2, 3], Бойко К.М.[3], Николаева А.Ю.[3], Корженевский Д.А.[3], Ракитина Т.В.[3], Липкин А.В.[3]

[1] Московский физико-технический институт
[2] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
[3] НИЦ "Курчатовский институт"

HU-белки регулируют архитектуру генома бактерий и отсутствуют в клетках высших организмов, поэтому их ингибиторы могут быть использованы в качестве нового поколения антимикробных препаратов. Задачей данной работы был поиск ингибиторов гистоноподобного HU-белка из S. melliferum (HUSpm), структура которого (PDB ID 4N1V, 1.36 Å, [1]) была выбрана в качестве мишени. HUSpm функционирует в виде гомодимера. Поэтому в качестве первого сайта связывания ингибиторов был выбран сайт димеризации, который имеет большую площадь и высокую гидрофобность, что обеспечивает высокую прочность связывания. Для второго сайта связывания (рис.1) были выбраны ДНК-связывающие петли белка. Данных о структуре HUSpm в комплексе с ДНК нет, а в имеющейся структуре ДНК-связывающие петли не разрешены. Поэтому, для построения комплекса HUSpm-ДНК использовади моделирование по гомологии с помощью программы MODELLER. В качестве шаблона был взят белок IHF (PDB ID 1IHF). Моделирование потенциальных ингибиторов проводили методом виртуального скрининга коммерческой библиотеки Mcule. Были использованы простые фильтры: Basic Property Filter и правило Липински (<5 H-bond donors, <10 H-bond acceptors, <500 molecular mass, <5 logP). Предполагаемая растворимось определялась по количеству доноров и акцепторов водородных связей и по величине LogP (рассматривался logP <5).

В результате были отобраны 20 ингибиторов димеризации с величиной docking score, определяющей прочность связывания, от -6.4 до -9.5 и 15 ингибиторов ДНК связывания с величиной docking score от -6.0 до -6.8.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант №15-14-00063.

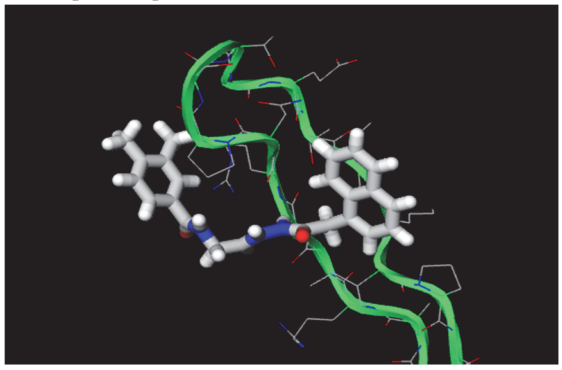


Рис.1. Ингибитор, связанный в ДНК-связывающем сайте HUSpm

[1] К.Бойко и др. // Acta F, 2014.

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПУРИННУКЛЕОЗИДФОСФОРИЛАЗЫ ИЗ E.COLI В КОМПЛЕКСЕ С 7-ДЕАЗАГИПОКСАНТИНОМ

Тимофеев В.И.[1,2], Жухлистова Н.Е.[1], Абрамчик Ю.А.[3], Муравьева Т.И.[3], Есипов Р.С.[3], Куранова И.П.[1,2]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2]НИЦ «Курчатовский институт»

[3]Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Пуриннуклеозидфосфорилазы (ПНФ) (КФ 2.4.2.1) катализируют обратимую реакцию фосфоролиза нуклеозидов, в ходе которой расщепляется гликозидная связь C-N и образуется свободное основание и α-D-рибофуранозил-1-фосфат (рибозо-1-фосфат). ПНФ играют важную роль в процессе метаболизма нуклеотидов, что обусловливает интерес к их изучению. Реакция трансгликозилирования, которую способны катализировать ПНФ, является ключевой в запасном пути синтеза нуклеозидов и регуляции внутриклеточного уровня свободных оснований.

В настоящей работе представлена пространственная структура комплекса ПНФ из E. coli с 7-деазагипоксонтином, полученная методом рентгеноструктурного анализа. Кристаллы получены в условиях микрогравитации методом встречной диффузии в капилляре через слой геля. От выращенных кристаллов собран рентгенодифракционный набор, решена и уточнена структура комплекса. Показано, что в кристаллической ячейке структуры ПНФ E.coli с 7-деазагипоксантином содержатся три независимые субъединицы шестимерной молекулы ПНФ, связанные локальной осью третьего порядка. Описано положение лиганда в активном центре, приведено сравнение комплекса с апо-формой фермента, описаны конформационные изменения, сопровождающие связывание лиганда.

Работа выполнена при поддержке ЦНИИМаш Роскосмоса.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ТВЕРДОЕ ТЕЛО - ЖИДКОСТЬ В ГИББСОВСКОМ МОНОСЛОЕ МЕЛИССОВОЙ КИСЛОТЫ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ Н-ГЕКСАН – ВОДА.

Тихонов А.М.

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 119333, Москва, Россия

Длительное время рядом авторов обсуждается возможность двумерного перехода твердое тело – жидкость на границе масло – вода [1, 2]. Согласно данным рентгеновской рефлектометрии с использованием синхротронного излучения в гиббсовском монослое мелиссовой кислоты на межфазной границе н-гексан – вода с повышением температуры T происходит резкий двумерный переход из кристаллического состояния с площадью, приходящейся на молекулу, A ≈ 17 Å^2, в жидкое с A ≈ 23 Å^2 [3]. Интенсивность диффузного рассеяния в твердой фазе границы более чем на один порядок величины превышает интенсивность рассеяния в жидкой фазе, что указывает на наличие у первой протяженной поперечной структуры [4]. При этом переход характеризуют две температуры T_m и T^*. С повышением T в T_m происходит резкое плавление монослоя, непосредственно на границе с н-гексаном. При дальнейшем возрастании T адсорбированный жидкий слой сужается, так что при температуре выше T^* на границе присутствует только однородный жидкий монослой карбоновой кислоты. В рамках теории капиллярных волн предложена модель строения границы, которая позволяет согласовать между собой данные рассеяния и рефлектометрии.

[1] Q. Lei, C. D. Bain, Phys. Rev. Lett. 92, 176103 (2004).

[2] L. Tamam, D. Pontoni, Z. Sapir, Sh. Yefet, E. Sloutskin, B. M. Ocko, H. Reichert, and M. Deutsch, PNAS 108, 5522 (2011).

[3] А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ 102, 620 (2015).

[4] А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ 104, 318 (2016).

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО КОМПЛЕКСА БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА F ЦИАНОБАКТЕРИЙ

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики
e-mail:xbgth@yandex.ru

Белок-белковые взаимодействия лежат в основе большинства биологических процессов, протекающих в живой клетке. В данной работе на основе вычислительного эксперимента производится реконструкция процесса сближения молекул белков и проводится анализ его отличительных особенностей для цианобактерий. Предложен оригинальный подход к реконструкции последовательности событий, происходящих при диффузионном сближении белков, с использованием методов броуновской и молекулярной динамики и иерархического кластерного анализа [1].

Методом броуновской динамики было получено множество электростатически выгодных взаимных расположений белков, соответствующее состоянию диффузионного захвата, и при помощи иерархического кластерного анализа были установлены наиболее типичные структуры таких комплексов. Нами был проведен сравнительный анализ электростатически выгодных взаимных расположений белков пластоцианина и цитохрома f из высших растений [2] и цианобактерий.

Данный вычислительный эксперимент позволил выявить отличия формирования короткоживущих белок-белковых комплексов в цианобактериях.

Вычислительные эксперименты проводились с использованием суперкомпьютера Ломоносов в Суперкомпьютерном центре Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова [3]. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 15-07-08927, 14-04-00302 и 15-04-08681.

[1] Хрущев С.С., Абатурова А.М. и др. // Компьютерные исследования и моделирование, 2013, т. 5, № 1, с. 47-64.

[2] С.С. Хрущев, А.М. Абатурова и др. // Биофизика, 2015, том 60, № 4.

[3] Воеводин Вл.В., Жуматий С.А. и др. // Открытые системы. - Москва: Издательский дом «Открытые системы», N 7, 2012. С. 36-39.

CHARACTERIZATION AND CRYO-EM RECONSTRUCTION OF TECTVIRIDAE THERMUS SPP. BACTERIOPHAGE PHIKO

Sedov A.S.[1,2] , Lopatina A.V.[3], Pechnikova E.V.[4], Severinov K.V.[3], Miroshnikov K.A.[2] , Sokolova O.S.[1],
[1] Lomonosov Moscow State University
[2] Shemyakin-Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry RAS
[3] Institute of Gene Biology RAS
[4] FEI

Tectiviridae is a family of tailless phages infecting Gram-negative bacteria. Tectiviral particles shell consists of both a lipid membrane and a icosahedral protein capsid protecting double-stranded DNA. Bacteriophage PhiKo is propagated on thermophilic bacteria belonging to Thermus spp. The PhiKo genome contains 11,129 bp, and encodes 26 putative ORFs, but very few similarities were found to any known genes. The only recognized by means of bioinformatics proteins are major capsid protein (ORF 13), peptidoglycan hydrolase (ORF20) and ATPase (ORF14). The most standing out feature of the object is the absence of a phage-encoded DNA polymerase typical for other Tectiviridae phages. At least 4 proteins of PhiKo's structural proteome were able be identified by mass-spectrometry method.

Controlled pore glass chromatography was used for purifying PhiKo particles. Vitrified in liquid ethane phage particles were studied by cryo-electron tomography on the Titan Krios (FEI) at 300 kV. Subsequent tomography and 3D reconstruction revealed a 65 nm icosahedral capsid with T=25, and an uneven internal lipid layer, with packed DNA genome. The structure of PhiKo is notably different from the most studied member of the Tectiviridae family, Enterobacteria phage PRD1.

The study is supported by RFBR grant # 16-04-01587. Authors would like to thank the Resource Facility Center for scanning probe and electron microscopy of Kurchatov Institute for use of Titan Krios.

Секция 4. Кристаллография и когнитивные исследования

НЕЙРОФОТОНИКА И ОПТОГЕНЕТИКА КОГНИТИВНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ МОЗГА

Анохин К.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
НИИ нормальной физиологии им. П.К.Анохина
МГУ им. М.В.Ломоносова
k.anokhin@gmail.com

Поведение, мышление и познание требуют согласованной работы нервных клеток многих областей мозга. В задачи нейронауки входит идентификация нейронов, входящих в такие распределенные функциональные системы, характеристика их когнитивной специализации и их причинно-следственных взаимодействий. Традиционно для этого использовались электрофизиологические методы. Развиваемый нами подход основан на использовании экспрессии немедленных ранних генов (НРГ), служащей индикатором информационных процессов в нервных клетках. Это свойство НРГ позволяет осуществлять крупномасштабное клеточное картирование активности когнитивных сетей мозга. Представленный в настоящей работе подход к визуализации когнитивных нейронных сетей основан на генетическом захвате специализированных когнитивных нейрональных групп с помощью метода опыт-зависимой Cre-loxP рекомбинации у трансгенных линий мышей Fos-CreERT2 и Arc-CreERT2. Мы совместили этот метод генетического захвата клеток нейронной сети с методами молекулярного мечения типов нервных клеток и визуализации экспрессии в них эндогенных НРГ при формировании и/или извлечении памяти о когнитивных событиях (Рис. 1). Соединение этого подхода с технологиями оптического просветления тканей, плосколучевой оптической томографией и прижизненной двухфотонной микроскопией позволяет осуществлять визуализацию клеточных следов памяти и исследовать закономерности аллокации и коаллокации опыта в когнитивные нейронные сети мозга.

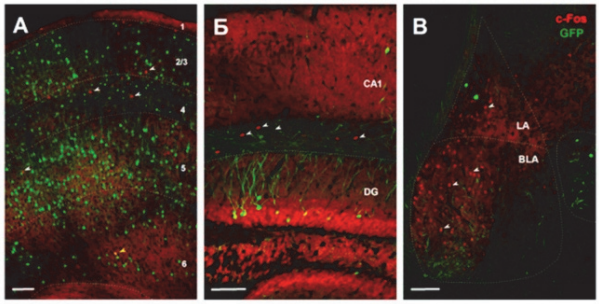


Рис.1. Двойное флуоресцентное выявление нейронов неокортекса (А), гиппокампа (Б) и миндалины (В) мозга мыши, прошедших Fos-Cre-зависимую рекомбинацию при обучении (зеленый цвет) и экспрессировавших эндогенный c-Fos в спокойном состоянии (красный).

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ # 14.607.21.0117 и РНФ # 14-15-00685.

НЕЙРОАЛГОРИТМ САМООБУЧЕНИЯ АГЕНТА КАРТИРОВАНИЮ И НАВИГАЦИИ В СТОХАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ НА ОСНОВЕ СЕТИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

Афанасьев А.Н., Соболев Д.А.
МФТИ ГУ
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: tilzziter@gmail.com

Актуальность. На данный момент в мире бурно развиваются исследования алгоритмов автономной навигации агентов в некоторой рабочей среде. Примером применения таких алгоритмов являются, например, картографирование и изучение некоторой местности, задачи патрулирования, автономные средства передвижения. Каждая из приведенных областей включает в себя широкий спектр разносторонних задач. Безусловным ядром каждой из них является ориентирование агента в пространстве, а также реакция на его изменения.

Цели и задачи. В работе определены следующие требования к алгоритму обучения автономной навигации. Во-первых, алгоритм должен позволять агенту автономно строить модель неизвестной среды, а при её изменении, агент должен дополнять модель новыми деталями, сохраняя при этом память о старых. Во – вторых, агент должен осуществлять навигацию из текущего состояния в произвольное целевое и переключаться между альтернативными стратегиями достижения цели при изменении среды.

Реализация. Для реализации описываемого алгоритма была выбрана модель адаптивного поведения, базирующаяся на сети нелинейных динамических элементов - функциональных систем. Модель отражает основные принципы теории функциональных систем П.К. Анохина и показывает высокую эффективность в сравнении с классическими алгоритмами q-обучения.

Результаты. Разработанный алгоритм имеет следующие преимущества. Теоретические – а) независимость реализации для сред различного размера. Прикладные – а) минимизация информации, используемой для навигации, б) возможность планирования вероятностных маршрутов, в) нет жесткого условия знания всей среды для планирования маршрутов. Адаптивные – а) двойственная оптимизация маршрутов по вероятности и длине, б) деление информации о среде на общую и актуальную и приоритезация актуальной.

ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЕ ОСНОВЫ ФЕНОМЕНОВ СОЗНАНИЯ И ВОЛЕВОГО ДЕЙСТВИЯ: IGNORAMUS ET IGNORABIMUS?

Величковский Б.М.
НИЦ «Курчатовский институт»
МГУ им. М.В. Ломоносова
Российский государственный гуманитарный университет
e-mail: velich@applied-cognition.org

В основе функционирования любого общества лежит представление о личной ответственности человека за совершаемые им поступки. Философия, социология, психология и юриспруденция подчеркивают при этом особое значение произвольности таких поступков: полная мера ответственности связана только с сознательно контролируемыми, намеренными действиями. Похожие по внешней форме и последствиям действия могут совершаться и без собственного сознательного намерения, например, чисто рефлекторно или же под жестким контролем извне. В этих случаях они обычно не влекут за собой сопоставимой ответственности. Со времен Канта, Джеймса и Гуссерля источником произвольных действий в социогуманитарных науках считается индивидуальное сознание, трансцендентальное «Я» человека. Эта трактовка сохранилась и в психоанализе, представители которого, правда, сосредоточились на поиске причин непроизвольных действий. Понятиям «Я» и «воля» трудно было найти место в ориентированных на естественнонаучные объяснительные схемы работах, поэтому судьба проблемы «произвольное действие» оказалась здесь более сложной. Так, еще в 1873 г. основатель электрофизиологии Дюбуа-Реймон в докладе «О границах естествознания» отнес эту проблему к категории «ignoramus et ignorabimus»: «Не знаем и не узнаем». Не останавливаясь на последующих перипетиях проблемы в истории науки, отметим только, что дискуссия продолжается сегодня в рамках нейрокогнитивной парадигмы, под определяющим влиянием новых физических методов изучения работы мозга. В докладе приведены новые экспериментальные результаты, позволяющие дать на этот поставленный в истории науки принципиальный вопрос вполне позитивный ответ – феномены сознания и истоки произвольного поведения доступны экспериментальному изучению, отвечающему самым жестким критериям естественнонаучного анализа. Более того, результаты таких исследований уже сегодня служат основой для создания нового поколения когнитивных технологий.

Работа выполнена на базе Курчатовского комплекса НБИКС-технологий при финансовой поддержке РНФ (проект № 14-28-00234).

СТРУКТУРНЫЕ, ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ И ЭФФЕКТИВНЫЕ СВЯЗИ ВНУТРИ ДЕФОЛТНОЙ НЕЙРОСЕТИ МОЗГА ЧЕЛОВЕКА: ИССЛЕДОВАНИЕ БАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СОЗНАНИЯ

Величковский Б.М.[1], Ушаков В.Л.[1], Шараев М.Г.[1,2]
[1]*НИЦ «Курчатовский институт»*
[2]*МГУ им. М.В. Ломоносова*
e-mail: velich@applied-cognition.org

В работе впервые проведен анализ совокупности связей, существующих между основными элементами дефолтной нейросети (DMN) мозга человека, активирующей в условиях отсутствие внешних задач и моторного покоя. В дополнение к результатам более раннего исследования [1], выполненного с помощью Динамического каузального моделирования (DCM) по материалам фМРТ-данных взаимодействия четырех структур – медиальной префронтальной коры (mPFC), задней поясной извилины (PCC) и билатеральных структур нижних теменных отделов коры (LIPC и RIPC) нами проанализированы эффективные (причинно-следственные) связи левого и правого гиппокампов (LHIP, RHIP). В экспериментах участвовали 30 праворуких добровольцев в возрасте от 20 до 28 лет, без выраженных неврологических нарушений. Основные полученные данные, представленные на рис.1, позволяют сделать вывод о выраженной, неизвестной ранее асимметрии связей левого и правого гиппокампов. Если левый гиппокамп активно влияет на все структурные узлы дефолтной нейросети, правый гиппокамп выполняет скорее рецептивные функции, получая интермодальную информацию от обоих нижних теменных отделов. Подобная структура связей позволяет впервые объяснить встречающийся при односторонних поражениях правого полушария феномен игнорирования пациентами левой половины окружения (left-sided spatial hemi-neglect). Данный феномен носит интермодальный характер, не ограничиваясь зрением. Характерно, что поражения левого полушария, как правило, не приводят к аналогичному эффекту выпадения правой части пространственного поля.

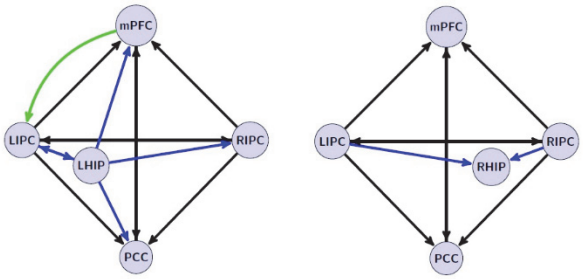


Рис.1. Наилучшие модели на уровне группы для взаимодействий левого и правого гиппокампов и их нетривиальные значимые ($p<0.05$) связи.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 14-28-00234).

[1] Sharaev MG, Zavyalova VV, Ushakov VL, Kartashov SI, Velichkovsky BM. (2016) Effective Connectivity within the Default Mode Network: Dynamic Causal Modeling of Resting-State fMRI Data. Front Hum Neurosci. 10:14. doi: 10.3389/fnhum.2016.00014

НЕАССОЦИАТИВНАЯ И АССОЦИАТИВНАЯ ФОРМЫ ПАМЯТИ У МЫШЕЙ: СВОЙСТВА, ФОРМИРОВАНИЕ СООТНОШЕНИЙ И НЕЙРОНАЛЬНЫЕ СУБСТРАТЫ

Воробьева Н.С., Ивашкина О.И., Торопова К.А., Анохин К.В.
НБИКС «Курчатовский институт»
e-mail: vorobyeva.nataliya.s@gmail.com

Способность к формированию ассоциаций является одной из фундаментальных особенностей когнитивных функций. Считалось, что формирование ассоциаций возможно только между перекрывающимися во времени событиями (И.П.Павлов, 1951, Rudy and Wright-Hardesty 2005). Однако появились данные о возможности формирования ассоциаций между расставленными во времени событиями (Fanselow 1990, Rudy and O'Reilly 1999, Haritha et al. 2013). Однако формирование расставленных ассоциаций происходит за счет извлечения неассоциативной памяти о первом событии при втором событии (Rudy et al. 2004). Целью данной работы было исследование соотношения неассоциативной и ассоциативной памяти в экспериментальной модели у мышей на поведенческом и нейрональном уровне.

В данной работе животных обучали в модели условно-рефлекторного замирания с предварительным предъявлением обстановки. Мышей подвергали трем типам процедур: (1) предварительному предъявлению обстановки для формирования неассоциативной обстановочной памяти; (2) нанесению немедленного электрокожного раздражения (ЭКР) в той же обстановке, для формирования ассоциативной аверсивной; и (3) тестированию ассоциативной обстановочной памяти по проявлению условной реакции замирания в подкреплявшемся контексте.

Для оценки длительности хранения неассоциативной обстановочной памяти и для выявления ее динамики, мышам давали обследовать обстановку, а затем через различные промежутки времени наносили немедленное ЭКР (1мА, 2 сек) и тестировали ассоциативную память через 24 часа после ЭКР. Было показано, что при оставлении немедленного ЭКР от обследования обстановки на 30 мин, 6 часов, 24 часа, 3 дня, 7 дней и 30 дней у мышей формировалась долговременная ассоциативная память, что выражалось в повышении уровня замирания при тестировании у мышей группы «Обучение» по сравнению с контрольными группами «ЭКР» и «Обстановка». Таким образом, неассоциативная форма памяти долговременна и может быть извлечена и использована для формирования ассоциативной памяти. При оценке длительности хранения ассоциативной памяти об обстановке животных тестировали через 24 часа и 30 дней после нанесения немедленного ЭКР. Сформировавшаяся таким образом долговременна и хранится как минимум в течение 30 дней.

Для оценки специфичности устанавливающейся ассоциативной памяти животным давали обследовать обстановку А, а затем через 3 дня наносили немедленное ЭКР либо в той же обстановке А, либо в новой обстановке В. При последовательном тестировании в обстановках А, В и С было показано, что ассоциативная память об обстановке А формировалась только если ЭКР наносили так же в обстановке А. Кроме того, ассоциативная память была специфичной относительно предварительно обследованной обстановки А.

Ранее было показано, что для формирования ассоциативной и неассоциативной памяти, в модели условно-рефлекторного замирания с предварительным предъявлением обстановки у крыс критически необходим гиппокамп (Rudy et al. 2004), однако прямого сопоставления вовлечения разных областей гиппокампа ранее не проводили.

Далее было проведено сопоставление популяций нейронов разных зон гиппокампа, активированных при извлечении обстановочной памяти (по количеству Fos-положительных клеток) у мышей группы «Обучение», у которых сформирована ассоциативная память, группы «Обстановка», у которых сформирована неассоциативная и у мышей контрольной группы «ЭКР». Было показано, что извлечение неассоциативной памяти об обстановке приводило к активации зоны CA1 и зубчатой фасции гиппокампа, в то время как извлечение ассоциативной памяти об обстановке приводило к специфической активации зоны CA1. При этом количество Fos-положительных клеток в зоне CA1 у животных группы «Обучение» было значимо увеличено по сравнению с животными группы «Обстановка».

Таким образом, в работе было показано, что ассоциативная память об обстановке у мышей может быть сформирована при извлечении ранее сформированной обстановочной неассоциативной памяти. На основании полученных данных, можно предполагать, что формирование ассоциаций происходит при условии активации в момент ассоциативного обучения популяций нейронов зоны CA1 гиппокампа, участвовавшей в формировании уже давно сложившейся обстановочной неассоциативной памяти.

Работа поддержана грантом РНФ №14-15-00685

Bourtchouladze R., Abel T., Berman N., Gordon R., Lapidus K., Kandel, E.R. 1998. Different training procedures recruit either one or two critical periods for contextual memory consolidation, each of which requires protein synthesis and PKA. Learning & Memory 5, 4–5, 365–374.

Fanselow M.S. 1990. Factors governing one-trial contextual conditioning. Animal Learning Behavior 18, 3, 264–270.

Haritha A.T., Wood K.H., Ver Hoef L.W., Knight D.C. 2013. Human trace fear conditioning: right-lateralized cortical activity supports trace-interval processes. Cognitive Affective Behavioral Neuroscience 13, 2, 225-237.

Rudy J.W., O'Reilly R.C. 1999. Contextual fear conditioning, conjunctive representations, pattern completion, and the hippocampus. Behavioral Neuroscience 113, 5, 867-880.

Rudy J.W., Huff N.C., Matus-Amat P. 2004. Understanding contextual fear conditioning: insights from a two-process model. Neuroscience Biobehavioral Review 28, 675–685.

Rudy J.W., Wright-Hardesty K. 2005. The temporal dynamics of retention of a context memory: something is missing. Learning & Memory 12, 172-177.

АДАПТАЦИЯ АЛГОРИТМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МУЛЬТИАГЕНТНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ЗАДАЧ СВЯЗИ ГРУПП РОБОТОВ

Воронин И.В., Хоменко М.Д.
ИПЛИТ РАН

Мобильные роботы с использованием технологии ZigBee для группового взаимодействия разработаны в ИПЛИТ РАН. Алгоритмы связи адаптируются для управления мобильными автономными беспилотными объектами и группового перемещения по поверхности или в пространстве. Это востребовано на больших площадях для мониторинговых и поисковых задач. Для управления мобильным агентом в контроллер робота собственной разработки интегрирована технология ZigBee. Для группового взаимодействия используется единый центр управления, при этом у робота остается автономность в решении локальных задач. Мобильные агенты могут выполнять задачи сбора данных и поиска в режиме онлайн и их передачу в единый центр сбора параметров и принятия решений. Для описания взаимодействия используется абстрактная модель конечных автоматов. Для локализации роботов в пространстве анализируется информация о Received Signal Strength Indication (RSSI). Исследуется способность и скорость выполнения поисковых задач в зависимости от внешних и начальных условий. Показана возможность выполнения групповых поисковых задач.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБУЧЕНИЯ В СЕТИ НЕЙРОНОВ IN VITRO

Дегтерев А.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: degterev@physics.msu.ru

На данный момент в мировой практике вычислительных экспериментов не существует модели культуры нейронов, динамика активности которой полностью согласовывалась бы с активностью культур нейронов *in vitro*. Более того, не существует даже общего стандартного подхода, комбинирующего основные компоненты моделируемой сети (модели нейрона, архитектуру связей, модели синапсов, модели шума мембранного потенциала).

В настоящей работе представлена математическая модель культуры нейронов, объединяющая в себе как можно больше факторов, характеризующих свойства культуры нейронов *in vitro*, однако являющаяся при этом относительно простой для моделирования и изучения системой. При моделировании в данной работе использовалась сеть, состоящая из 5000 нейронов, расположенных в плоском пространстве, с моделью связей, реализующей в основном ближние связи между нейронами, и с моделью долговременной синаптической пластичности. Данная реализация модели позволяет получить паттерны спонтанной активности сети, соответствующие наблюдаемой активности культур нейронов *in vitro*.

Главной задачей было изучение вопроса, возможно ли применить известный протокол обучения культур нейронов *in vitro* [1] к созданной математической модели, и исследовать вопрос будет ли модель демонстрировать адаптацию активности при стимуляции с обратной связью. Протокол обучения был адаптирован для модели культуры нейронов, что позволило получить данные, согласующиеся с экспериментами обучения культур нейронов *in vitro*: были получены образцы как успешного, так и неудачного обучения модели сети.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 15-11-30014

[1] Shahaf G., Marom S. Learning in networks of cortical neurons //The Journal of Neuroscience. – 2001. – Т. 21. – №. 22. – С. 8782-8788.

ИЗУЧЕНИЕ НЕЙРОМОРФНЫХ СИСТЕМ ТИПА ПРОСТЕЙШИХ СЕТЕЙ-КЛАССИФИКАТОРОВ И ЛОКАЛЬНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРАВИЛ ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ МЕМРИСТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Емельянов А.В.[1,2], Лапкин Д.А.[1,2], Демин В.А.[1,2], Малахова Ю.М.[1], Кашкаров П.К.[1,2,3], Ковальчук М.В.[1,2,3]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *МФТИ*
[3] *МГУ им. М.В. Ломоносова*
e-mail: emelyanov_av@nrcki.ru

В последнее время актуальным является направление по конструированию и исследованию свойств нейроморфных систем (НС) из искусственных материалов. Базовыми элементами любых НС являются нейрон (пороговый элемент, сумматор) и синапс (элемент памяти). Нейроны реализованы на базе стандартной КМОП технологии. Для реализации синапса предлагается использовать мемристоры [1]. В данной работе реализованы НС на основе мемристоров из полианилина. Существует всего несколько работ по аппаратной реализации простейшей НС – элементарного перцетрона [2]. Элементарный (однослойный) перцептрон – простейшая НС, способная обучаться выполнению задачи по линейному разделению нелинейных множеств. При этом нет работ, демонстрирующих реализацию более сложных НС на основе мемристоров, позволяющих, например, решать линейно неразделимые задачи классификации образов. Поэтому целью настоящей работы является исследование возможности аппаратной реализации с помощью мемристоров многослойного перцептрона.

Для демонстрации принципиальной возможности обучению решению линейно неразделимых задач была выбрана операция «Исключающее ИЛИ». Эта операция может быть представлена как задача классификации, где входные векторы (0,0) и (1,1) принадлежат классу «0», а оставшиеся два – классу «1». Для реализации обучения мы использовали алгоритм обратного распространения ошибки. Также опробованы локальные правила обучения между нейронами «STDP» (spike-timing-dependent plasticity).

Работа выполнена в РЦ электрофизических методов при частичной поддержке РФФИ (15-29-01324).

[1] Y.V.Pershin, M.Di Ventra Adv Phys 60 145 (2011)
[2] V.A.Demin, V.V.Erokhin et al. Organ Electr 25 16 (2015)

ПРОЛИФЕРАЦИЯ КЛЕТОК В РАЗНЫХ СТРУКТУРАХ ГОЛОВНОГО МОЗГА МЫШЕЙ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ПАМЯТИ

Копаева М.Ю.[1], Ефимова О.И.[1], Анохин К.В.[1,2,3]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *МГУ им. М.В. Ломоносова*
[3] *НИИ нормальной физиологии им. П.К. Анохина*
e-mail: kopaeva_my@nrcki.ru

Для понимания того, как устроены нейрокогнитивные сети и как они работают при приобретении, систематизации и хранении когнитивной информации, необходимо исследовать не только межнейронные связи, но и большое разнообразие клеток мозга, оказывающее влияние на функционирование системы в целом.

Структурная модификация синапсов и повышение эффективности синаптической передачи требуют усиления синтеза белка и РНК. Однако, существуют данные о том, что синтез ДНК также необходим для формирования долговременной памяти. В связи с этим, целью работы было исследовать, влияет ли контекстуальное обучение условно-рефлекторному замиранию на изменение количества клеток, включивших 5-бромо-2'-дезоксиуридин (BrdU, маркер синтеза ДНК), в различных структурах мозга мышей после однократного сеанса выработки данного поведения и определить преимущественный фенотип этих клеток.

Обучение стимулировало синтез ДНК в клетках мозга взрослых мышей. Увеличение количества BrdU+ клеток наблюдалось как в классической зоне пролиферации (зубчатой фасции гиппокампа), так и в префронтальной и моторной областях неокортекса и базолатеральном и латеральном ядрах миндалины взрослых мышей. Клетки, включившие BrdU в неокортексе, были одновременно иммунореактивны к маркерам предшественников олигодендроглии (NG2+), нейральных стволовых предшественников (Nestin+) и нейробластов 1 типа (DCX+). Введение азидотимидина до обучения вызывало нарушение долговременной памяти в тесте на обстановку и достоверное снижение включения BrdU в ДНК клеток в разных структурах мозга мышей. Полученные результаты указывают на возможную роль пролиферации клеток в механизмах консолидации и поддержания долговременной памяти.

Работа проведена с использованием оборудования РЦ НКИ.

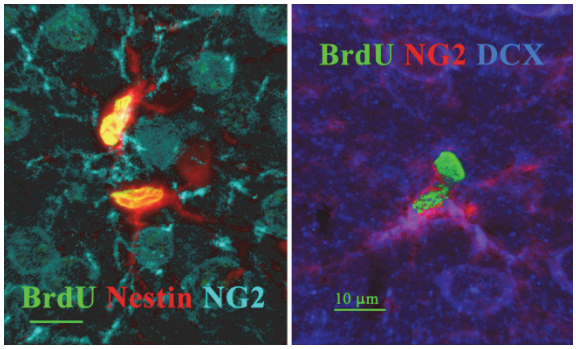


Рис.1. Пролиферация клеток NG2+/Nestin+/DCX+ при обучении в неокортексе.

УЧАСТИЕ НЕЙРОНОВ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ И СЛОЁВ КОРЫ ГОЛОВНОГО МОЗГА В ФОРМИРОВАНИИ И ИЗВЛЕЧЕНИИ АССОЦИАТИВНОЙ ПАМЯТИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ FOS-НЕЙРОИМИДЖИНГА

Куницына Т.А., Торопова К.А., Ивашкина О.И., Рощина М.А., Анохин К.В.
НИЦ «Курчатовский Институт» (Москва, РФ)
kunitsyna.tatiana@gmail.com

Долговременная пластичность нейронов коры головного мозга и их связей обеспечивает его вовлечение в формирования и извлечение ассоциативной памяти. Существуют локальные исследования, посвящённые этим процессам, но систематических исследований вовлечения нейронов разных слоёв коры проведено не было.

Целью данной работы было исследовать участие нейронов различных слоёв коры головного мозга в формировании и извлечении ассоциативной памяти у мышей. Был использован метод Fos-нейроимиджинга, позволяющий выявлять популяции нейронов, активированные разными когнитивными эпизодами (Svarnik et al. 2005).

Для формирования ассоциативной памяти мышей (группа «Обучение») обучали в модели условно-рефлекторного замирания на условный сигнал, трижды сочетая звуковой сигнал с электрокожным раздражением (ЭКР). Мышам группы «Псевдообучение» стимулы не сочетали друг с другом. Мышам группы «Активный контроль» предъявляли только звук. У мышей всех групп забирали мозг через 90 мин после обучения и 90 мин после теста на звуковой сигнал через 24 часа после обучения. Анализ проводили по слоям в ассоциативных и сенсорных зонах коры головного мозга.

Было показано, что условно-рефлекторное обучение на сигнал приводило к предпочтительной активации ассоциативных областей коры при извлечении памяти против предпочтительной активации сенсорных областей при формировании. Активация сенсорных зон коррелировала с проявлением реакции страха во время теста.

Работа поддержана грантом ФЦП по соглашению № 14.607.21.0117

[1] Svarnik O.E., Alexandrov Yu. I., Gavrilov V.V., Grinchenko Yu.V., Anokhin K.V. 2005. Fos expression and task-related neuronal activity in rat cerebral cortex after instrumental learning. Neuroscience 136, 1, 33-42.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ПРОИЗВОЛЬНОГО КОНТРОЛЯ ДЕЙСТВИЯ И ВЫБОРА ИЗ МНОЖЕСТВА АЛЬТЕРНАТИВ В ГОЛОВНОМ МОЗГЕ ЧЕЛОВЕКА

Недолужко А.В.[1], Соколов А.С.[2], Цыганкова С.В.[1], Величковский Б.М.[1]
[1]*НИЦ «Курчатовский институт»*
[2]*Институт биоинженерии, ФИЦ Биотехнологии РАН*
e-mail: nedoluzhko@gmail.com

Работа посвящена амбициозной, до сих пор нерешённой задаче естественнонаучного объяснения процессов произвольного контроля действия в головном мозге человека. Каким образом популяция клеток, состоящая из примерно 100 млрд отдельных нейронов и на порядок большего числа клеток глии, способна осуществлять целеполагание и контролировать выполнение ведущего к цели действия? Ответ на этот вопрос критически важен для создания нейроморфных распределенных архитектур суперкомпьютеров новых поколений, уникальные вычислительные возможности которых (например, при распознавании больших массивов сложных мультимодальных образов) будут сочетаться с исключительной энергоэффективностью.

Целью искомой работы стало проведение анализа генетических механизмов функционирования зон головного мозга человека, участвующих в волевом контроле и выборе из множества альтернатив (зоны 10, 24, 32 и 47, по классификации Бродманна). В качестве контрольных были взяты области коры, связанные с процессами зрительного сенсорного анализа (BA17) и речевой артикуляции («зона Брока», BA44). Из данных зон была выделена тотальная РНК (всего 49 образцов), которая использовалась для приготовления кДНК библиотек, пригодных для последующего секвенирования на базе технологии Illumina. По результатам биоинформатического анализа экспрессии был выявлен спектр из 810 генов, которые дифференциально экспрессируются в разных зонах головного мозга, ответственных за произвольный контроль действия и выбор из множества альтернатив. Дополнительно установлена специфика регуляторных процессов в этих зонах коры. Показано также, что наибольшие отличия, как в отношении числа генов, так и в отношении их регуляторных механизмов, присутствуют между целевыми зонами головного мозга человека и выбранной в качестве контрольной зрительной зоной BA17.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 14-28-00234).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕКРЫТИЯ ПОПУЛЯЦИЙ АКТИВИРОВАННЫХ НЕЙРОНОВ ГОЛОВНОГО МОЗГА ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ОТСТАВЛЕННОГО СЛЕДОВОГО УСЛОВНОГО РЕФЛЕКСА

Саидов Х.М.[1], Ивашкина О.И.[1], Торопова К.А.[1], Анохин К.В.[1,2]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *НИИ Нормальной физиологии РАН*
e-mail: khalid.saidov@gmail.com

Несмотря на многочисленные исследования механизмы формирования ассоциативной памяти в нервной системе остаются одной из нерешенных проблем нейробиологии. Результаты последних исследований вскрыли некоторые молекулярно-клеточные закономерности распределения и сохранения нового когнитивного опыта в мозге. Также было продемонстрировано наличие длительных следовых молекулярных процессов в нейронах, возникающих после эпизода обучения.

В совокупности эти данные позволяют предположить возможность формирования при определенных условиях до сих пор неисследованной формы ассоциативной памяти-отставленной во времени ассоциативной связи, которая, предположительно, может образовываться за счет вовлечения в разнесенные во времени эпизоды обучения общих популяций нейронов.

Для исследования этой формы памяти была разработана поведенческая модель отставленного следового условного рефлекса. В отличии от классического павловского обуславливания она предполагает отставление этапов научения (нанесения условного и безусловного сигналов) во времени.

Для анализа перекрытия популяций нейронов, активированных в такой когнитивной модели, была разработана методика бифлуоресцентной (двухцветной) in situ гибридизации. Данный подход позволяет визуализировать коактивацию нервных клеток в двух эпизодах активности мозга, разделив флуоресцентный сигнал от ядерной и цитоплазматической форм мРНК не только по характерному паттерну, но и по цвету, усовершенствуя таким образом процесс дальнейшего анализа результатов.

[1] Silva et al. // Nature Reviews Neuroscience, 2014, vol. 15, issue: 3, p. 157-69.

[2] Denise J. Cai et al. // Nature, 2016, vol. 534, p. 115-118.

МЕТОДЫ ВЫЯВЛЕНИЯ И АНАЛИЗА ПОВЕДЕНЧЕСКИХ СПЕЦИАЛИЗАЦИЙ НЕЙРОНОВ ДЛЯ НЕЙРОКОГНИТИВНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Сварник О.Е.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: olgasvarnik@gmail.com

Живые организмы любого уровня сложности отличаются от неживых объектов тем, что способны адаптироваться к окружающей их среде за счет изменения процессов своего функционирования. В частном случае организмов с нервной системой, это проявляется в виде изменений поведения организма. В самом межпарадигмально широком смысле нейробиологическим основанием научения (продолжительно сохраняющихся изменений поведения вследствие опыта) принято считать возникновение определенного паттерна активности в определенной популяции, группе, системе, ансамбле, сети, цепи или констелляции нейронов. На уровне отдельных нейронов такие паттерны проявляются как возникновение специфической, по отношению к различным актам поведения, активации. Наличие стабильной поведенчески специфической активации было многократно продемонстрировано в самых разных уже выученных поведенческих актах, как у людей, так и у животных. Такая поведенческая специализация нейронов является постоянной, т.е. специфические активации нейронов манифестируются при повторных выполнениях поведения, относительно которого они специализированы. Выявление таких специализаций проводится на основании сопоставления временных отрезков генерации потенциалов действия нейрона с выявляемыми поведенческими актами. В настоящее время существует несколько способов выделения событий генерации потенциалов действия нейронов, в том числе к таким методам относится метод регистрации нейронной активности при помощи микроэлектродов имплантируемых в мозг. Использование такой методики позволило нам установить закономерности изменений специфической и неспецифической нейронной активности при формировании нового поведения.

Работа проведена с использованием оборудования Ресурсного центра нейрокогнитивных исследований Курчатовского комплекса НБИКС-технологий.

ПОВТОРЯЮЩИЕСЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ АКТИВАЦИЙ В НЕЙРОНАЛЬНЫХ КУЛЬТУРАХ ПРИ СТИМУЛЯЦИИ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ

Татаринцев М.К.[1,2], Соколов И.С.[1,3], Хасанов Р.Ю.[1,4], Азиева А.М.[1]

[1] НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

[2] МФТИ, Долгопрудный

[3] РНИМУ им. Н. И. Пирогова, Москва

[4] МГУ им. Ломоносова, Москва

e-mail: mrmihap@yandex.ru

Современные исследования пластичности нейрональных сетей, развивающихся in vitro, проводят при помощи мультиэлектродных матриц, позволяющих регистрировать активность отдельных клеток в популяции из десятков тысяч нейронов. Диссоциированные нейроны, высаженные на поверхность, обработанную адгезионным покрытием, формируют монослойную культуру клеток. На сети нервных клеток in vitro легко воздействовать посредством электрической стимуляции. В настоящее время основным препятствием для изучения механизмов пластичности в культурах служит плохая воспроизводимость распространенных парадигм обучения нейросетей in vitro. Поэтому целью данной работы является исследование вариабельность паттернов пачечной активности культуры при стимуляции с обратной связью. Протокол стимуляции с обратной связью был использован из работы [1]. Пачечная активность описывалась интегральной затухающей функцией от электрического сигнала. Затем полученные данные кластеризовались для выявления разнообразия типичного вида пачечной активности. Предварительные результаты анализа экспериментальных данных позволяют говорить о том, что стимуляция с обратной связью приводит к долговременной пластичности, в отличии от цикличной стимуляции.

[1] Shahaf G., Marom S. Learning in Networks of Cortical Neurons. // J Neurosci. 2001. № 21. С. 8782–8788.

ФОРМИРОВАНИЕ ПАМЯТИ О КОМПЛЕКСНОМ УСЛОВНОМ СИГНАЛЕ: ПОВЕДЕНЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ И КАРТИРОВАНИЕ ВОВЛЕЧЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ МЕТОДОМ FOS-НЕЙРОИМИДЖИНГА

Торопова К.А., Ивашкина О.И., Рощина М.А., Анохин К.В.

НИЦ «Курчатовский Институт»

email: xen.alexander@gmail.com

Вопрос о том, как в мозге кодируются комплексные стимулы (КУС) является актуальным для когнитивных наук. Компоненты КУС могут быть представлены как набор несвязанных признаков или же быть связаны в единую нейрональную репрезентацию. Предсказанием второй гипотезы является возможность модификации памяти о КУС при изменении значимости его компонентов и активация всей репрезентации КУС при извлечении памяти одним его компонентом. Настоящая работа была посвящена экспериментальной проверке этого предсказания. Мышей обучали на КУС, совместно предъявляя свет и звук в сочетании с электрокожным раздражением. Память о КУС и его звуковом компоненте успешно воспроизводилась на любых сроках после обучения. Однако память о световом компоненте созревала со временем: она не проявлялась до 3 дней после обучения, а затем стабильно сохранялась не менее 30 дней. Также проводили угашение памяти КУС или его компонентах через 1 или 7 дней после обучения. Через 1 день после обучения угашение любого компонента КУС не влияло на воспроизведение памяти о другом компоненте и полном КУС. Через 7 дней после обучения угашение памяти о любом из компонентов КУС приводило также к угашению памяти о другом компоненте и полном КУС. Было проведено картирование активации мозга по экспрессии немедленного раннего гена c-fos при извлечении памяти о КУС. При извлечении памяти о КУС и его компонентах активировалась прелимбическая область коры. При этом активация базолатерального ядра миндалины и париетальной ассоциативной коры происходила только при извлечении памяти о КУС, но не его компонентах. Таким образом, обе высказанные ранее гипотезы являются недостаточными, поскольку существуют три раздельные репрезентаций КУС и его компонентов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕИНВАЗИВНЫХ ЯМР-МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ И ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ПРОИЗВОЛЬНОГО МОТОРНОГО АКТА

Ушаков В.Л.[1], Седов А.С.[1,2], Величковский Б.М.[1]
[1]НИЦ «Курчатовский институт»
[2]ФГБУН Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН
e-mail: tiuq@yandex.ru

Работа посвящена картированию ключевых звеньев системы моторного контроля целенаправленных (goal-directed) и автоматизированных (habitual) движений с помощью метода функциональной МРТ. Эксперимент имел блоковый дизайн, определявшийся набором звуковых щелчков, на которые испытуемый должен был сжимать руку в кулак. Результаты группового анализа 15 испытуемых показали схожие активационные картины мозговых структур, свидетельствующие об их вовлечении в моторную деятельность в целом, а также выделили ряд различий, связанных с несовпадением нейронных сетей, участвующих в контроле автоматизированных и целенаправленных движений. В режиме habitual наблюдалась активация преимущественно вентральных отделов таламуса и всех отделов базальных ганглиев, тогда как в режиме goal-directed наблюдалась активация медиальных отделов таламуса и бледного шара. Применение событийно-связанной (event-related) функциональной МРТ позволило дополнительно исследовать пространственно-временную динамику активаций. На этапе сжимания руки в кулак наблюдалась активность сенсомоторных отделов коры (M1, PSC, PMC, SMA), островка, V-VI долек мозжечка, моторных отделов таламуса, а также бледного шара и скорлупы. На этапе произвольного удержания руки активность сенсомоторных отделов, мозжечковых структур, островка и стриопаллидарного комплекса уменьшалась, однако сохранялся небольшой кластер активации преимущественно в вентролатеральном ядре таламуса. На этапе разжимания руки наблюдалась активность в двух зонах: контралатеральной сенсомоторной коре (M1, PSC) и ипсилатеральном мозжечке.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 14-28-00234).

ОПТОВОЛОКОННЫЕ НЕЙРОИНТЕРФЕЙСЫ

Федотов И.В.[1,2,3], Почечуев М.С.[1,2], Ивашкина О.И.[2], Рощина М.А.[2], Амитонова Л.В.[3], Торопова К.А.[2], Сафронов Н.А.[1,2], Сидоров-Бирюков Д.А.[1,3], Федотов А.Б.[1,3], Анохин К.В.[2], Желтиков А.М.[1,2,3]
[1] МГУ им. М.В. Ломоносова
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
[3] Российский квантовый центр

Методы оптической физики открывают уникальные возможности для исследования мозга и высшей нервной деятельности. Развитие широкого арсенала новых оптических методов функциональной диагностики мозга, стимуляции отдельных нейронов и их сетей, а также молекулярно-оптической инженерии клеток мозга привело к созданию уникального, принципиально нового класса устройств нейрофотоники и лазерной нейроинженерии – волоконно-оптических нейроинтерфейсов. Нейроинтерфейсы этого типа обеспечивают возможность долговременной мультиплексной регистрации отклика флуоресцентных маркерных белков, а также фотостимуляции нейронной активности в глубоких слоях мозга живых свободноподвижных животных с минимальной степенью инвазивности. На этой основе в экспериментах с живыми свободноподвижными животными реализуются уникальные методики исследования процессов обучения и формирования долговременной памяти. Разработаны микросветоводные зондирующие системы на основе пучков оптических волокон, интегрированных с пьезосканирующим зеркалом. Такие системы использованы для мультиплексной визуализации пространственного распределения нескольких флуоресцентных маркеров в мозге живых свободноподвижных животных с субклеточным пространственным разрешением, а также безмаркерной визуализации на основе регистрации комбинационного рассеяния света в режиме эндоскопии с высоким пространственным разрешением. Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой программы “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научнотехнологического комплекса России на 2014–2020 годы” (соглашение о предоставлении субсидии 14.607.21.0092 от 21 ноября 2014, уникальный идентификатор прикладных научных исследований RFMEFI60714X0092).

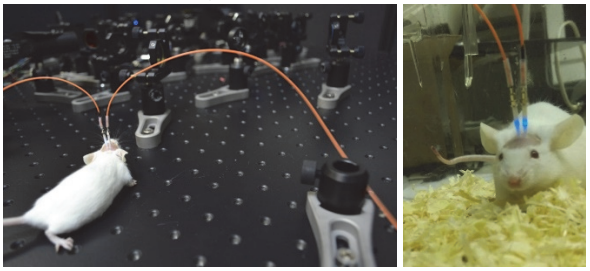


Рис.1. Оптоволоконные нейроинтерфейсы в экспериментах с бодрствующими, свободноподвижными животными.

АКТИВНОСТИ НЕЙРОНОВ КОРЫ ГОЛОВНОГО МОЗГА ПРИ ФОРМИРОВАНИИ И ИЗВЛЕЧЕНИИ АССОЦИАТИВНОЙ ПАМЯТИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ПРИЖИЗНЕННОЙ ДВУХФОТОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Груздева А.М., Ивашкина О.И., Анохин К.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
annadronova@mail.ru

Известно, что однажды сформированная память изменяется со временем, что находит отражение и в поведении. Вопрос о том, как при этом изменятся нейрональные субстраты, поддерживающие память, исследован недостаточно. Было показано, что при длительном хранении памяти происходит процесс системной консолидации, заключающийся в изменении соотношения ролей между гиппокампом, необходимым для формирования памяти и неокортексом, поддерживающим память в дальнейшем. При этом нейроны неокортекса также активируются при формировании памяти. Однако вопрос об их активации при формировании и извлечении памяти, остаётся открытым.

Целью данной работы было исследовать, каким образом идентифицированная популяция нейронов ассоциативной области неокортекса у мышей активируется при формировании и извлечении памяти в задаче условно-рефлекторного замирания на сигнал.

Работа была выполнена на трансгенных мышах линии Fos-EGFP, у которых активация промотора немедленного раннего гена c-fos запускает экспрессию зеленого флуоресцентного белка EGFP. Мышей обучали в задаче условно-рефлекторного замирания на звуковой условный сигнал. Через 24 часа после обучения проводили тестирование памяти на тот же звуковой сигнал. Для визуализации активности идентифицированной популяции нейронов был использован метод двухфотонной микроскопии, который позволяет регистрировать флуоресцентный сигнал EGFP в объеме мозга у бодрствующих животных. Визуализацию активности одной и той же популяции нейронов проводили за три дня до обучения, в день обучения и в день тестирования.

Анализ паттернов активации отдельных нейронов во все три дня регистрации показал, что наибольшая доля нейронов была активна во все три дня (79,3% от всех нейронов). Было выявлено, что часть нейронов, не активных до обучения, далее активировались как при формировании памяти, так и при извлечении долговременной памяти (10,4%). Часть нейронов активировалась только при обучении или извлечении памяти (2,8% и 1,9% соответственно).

Таким образом, в данной работе впервые были получены данные об активности одних и тех нейронов ассоциативной области неокортекса при обучении и извлечении памяти. Большая часть нейронов, активировавшихся при формировании памяти, так же была активна при извлечении памяти.

НЕЙРОАЛГОРИТМ САМООБУЧЕНИЯ АГЕНТА КАРТИРОВАНИЮ И НАВИГАЦИИ В КОДИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСНОГО УСЛОВНОГО СИГНАЛА НЕЙРОНАМИ КОРЫ ГОЛОВНОГО МОЗГА У МЫШЕЙ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ПРИЖИЗНЕННОЙ ДВУХ-ФОТОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Рощина М.А., Ивашкина О.И., Анохин К.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
marina.zots@gmail.com

Коллективом авторов был разработан протокол обучения условно-рефлекторному замиранию на комплексный условный сигнал, состоящий из нескольких дискретных сенсорных стимулов (света и звука), который позволяет моделировать формирование комплексной ассоциативной памяти в лабораторных условиях. При формировании такой сложной памяти может формироваться ассоциация не только между условным и безусловным стимулами, но и между несколькими условными стимулами. Известно, что в париетальной ассоциативной области коры происходит интегрирование информации, поступающей от разных сенсорных областей, в том числе от зрительной, слуховой и соматосенсорной. Целью данной работы было исследование паттернов активации нейронов париетальной ассоциативной области неокортекса при извлечении комплексной аверсивной памяти. Работа была выполнена на трансгенных мышах линии Fos-EGFP, у которых зеленый флуоресцентный белок экспрессируется сопряженно с белком Fos. Все мыши были успешно обучены в задаче условно-рефлекторного замирания на комплексный условный сигнал с помощью метода двухфотонной микроскопии были выявлены активные нейроны. Как у обученных, так и у контрольных мышей были найдены нейроны, которые специфически активируются при предъявлении отдельных компонентов комплексного условного сигнала (светового и звукового стимулов). Было показано, что у группы «Обучение» доля нейронов, активных во время извлечения памяти отдельными компонентами, но не самим комплексным условным сигналом, больше, чем у группы «АК». Полученные данные согласуются с гипотезой о том, что нейроны париетальной ассоциативной области неокортекса могут принимать участие в формировании ассоциации между стимулами разных сенсорных модальностей, в том числе и при ассоциативном обучении.

Секция 5. Кристаллографические методы в гуманитарных науках

ИССЛЕДОВАНИЕ МОНЕТНОГО СПЛАВА БОСПОРСКИХ СТАТЕРОВ III-IV ВВ. Н.Э. МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕТРОСКОПИИ (XRF) (ПО МАТЕРИАЛАМ КРУПНЕЙШЕГО КЛАДА ИЗ РАСКОПОК ФАНАГОРИИ)

Абрамзон М.Г.[1], Гунчина О.Л.[2]

[1] ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»

[2] ФГБУК «Государственный историко-археологический музей-заповедник «Фанагория»

e-mail: abramzon-m@mail.ru

Постановка задачи. Исследование сплава боспорских статеров из крупнейшего клада, открытого в 2011 г. на восточном некрополе Фанагории [1], проводится в рамках проекта РФФИ (№ 16-06-00217). Клад включает 3695 монет боспорских царей Ининфимея, Рескупорида V, Фарсанза, Савромата IV, Тейрана, Фофорса и варварские подражания статерам последнего. Уникальность комплекса состоит в том, что он содержит почти все известные эмиссии с 237 по 307 г. н.э. Большая часть монет представлена биллонными статерами Рескупорида V – 2132 экз. Цель исследования: методом XRF установить химический состав монетного сплава статеров данных царей и проследить по годам эмиссий динамику падения содержания серебра и золота в сплаве, выявить пики прогрессирующей деградации сплава и их корреляцию с датами походов варваров на Боспор. Как известно, поиск государством финансов для борьбы с варварами сопровождался инфляционными процессами в боспорской экономике – чрезмерно обильными или, напротив, крошечными эмиссиями статеров, а также «порчей» монеты, в условиях напряженной военной ситуации в Северном Причерноморье. Задача исследования почти четырех тысяч монет – беспрецедентна по объему: до сих пор подобные исследования боспорских монет ограничивались лишь небольшой репрезентативной выборкой [2; 3].

Методика. В нумизматических исследованиях особенно важен тот факт, что выбранный метод – неразрушающий. Рентгеновская спектроскопия традиционно применяется в области нумизматики с 1960-х годов [4], в том числе и для изучения монетных сплавов Боспора, в частности, статеров Рескупорида V, Тейрана, Фофорса [5]. Для определения качественного и количественного состава металлов и их сплавов в лаборатории Фанагорийского музея-заповедника применяется энергодисперсионный рентгенфлуоресцентный спектрометр M1 Mistral. При исследовании статеров из клада особую важность имеет послойное определение состава монетного сплава, поскольку в процессе реставрации при удалении с поверхности монет продуктов коррозии может происходить рафинирование поверхностного слоя. Отмечено, что после расчистки монет на поверхности низкопробного серебряного (билонного) статера проба сплава выше, чем в более глубоких слоях. Специфическая аналитическая задача, для которой применяется M1 Mistral, это анализ сплавов статеров Рескупорида V, Савромата IV, Тейрана и ранних выпусков Фофорса (286 г. н.э.), требующий высокой точности. Результаты анализа монет сохраняются в специальной электронной базе данных и при необходимости могут быть распечатаны в виде сертификата с отображением состава сплава и точным местом анализа на предмете.

Все биллонные монеты из Фанагорийского клада 2011 г. были покрыты продуктами коррозии меди, хотя хорошо известно, что данные монеты изготовлены из серебряного сплава, и металлическое ядро практически всех их имеет удовлетворительную сохранность. Довольно толстый слой продуктов коррозии, смешанных с почвенными наслоениями, в большинстве случаев не позволял идентифицировать изображения на монетах. Непосредственно после находки клад монет поступил в реставрацию. Проводилась химическая расчистка от продуктов коррозии до металла. Предположительно, при удалении продуктов коррозии меди поверхность монеты могла обогатиться серебром. На ряде статеров разных годов был сделан микрозондаж, позволивший определить состав монетного сплава как на поверхности, так и внутри ядра. Установлено, что погрешность составляет всего 0,02-0,03%.

Основные компоненты монетного сплава позднебоспорских статеров – медь, серебро, золото и свинец. В ряде монет встречается мышьяк. Предстоит выяснить его происхождение: добавлялся ли он в лигатуру или же входил в состав самородных металлов.

Результаты исследования. К настоящему моменту обследованы монеты эмиссий 242–248 гг. н.э., т.е. части дореформенного периода чеканки Рескупорида V. Монеты 242, 243 и 244 гг. имеют почти идентичный количественный состав сплава, но с 245 г. количество серебра в сплаве начинает заметно уменьшаться. Дальнейшее исследование будет направлено на выявление количество серебра и золота в сплаве статеров 248–251 гг., тем более что Фанагорийский клад отражает заметную интенсификацию монетной чеканки в данный период, накануне морских походов боранов, готов и герулов, начало которых приходится на 252–253 гг.

Проведенное исследование демонстрирует, что максимально высокие темпы чеканки на Боспоре, вызванные растущей потребностью государства в средствах в условиях напряженной военной обстановки, сопровождались инфляционными процессами и прогрессирующей деградацией качества драгоценного металла в статерах.

[1] Абрамзон М.Г., Кузнецов В.Д. Клад боспорских статеров III–IV вв. н.э. из Фанагории // Вестник древней истории, 2014, № 3, с. 56–86.

[2] Фролова Н.А. Монетное дело Боспора (середина I в до н.э. – середина IV в. н.э. Т. II. М., 1997, с. 146–149.

[3] Смекалова Т.Н., Дюков Ю.Л. Монетные сплавы государств Северного Причерноморья: Боспор, Ольвия, Тира. СПб, 2001, с. 90–104.

[4] Stos-Gale Z. Fluorescent and lead isotope analysis // A survey of numismatic research 1978–1984 / M. Price, E. Besly, D. MacDrowall, M. Jones, A. Oddy, eds. L., 1986, p. 978–1003.

[5] Смекалова Т.Н., Дюков Ю.Л. Монетные сплавы государств Северного Причерноморья: Боспор, Ольвия, Тира. СПб., 2001, с. 96.

АРХЕООСТЕОЛОГИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ КАК БИОЛИТЫ

Добровольская М.В., Шведчикова Т.Ю.
Институт археологии РАН (ИА РАН), Москва
e-mail: mk_pa@mail.ru

Минеральная составляющая скелетных тканей человека и животных из культурных слоев археологических памятников – особый источник данных как о прижизненных характеристиках индивидов, так и посмертных процессах, длившихся в условиях преднамеренного или непреднамеренного захоронения в грунте или депонирования в других условиях (например, водоем, пещера). Минеральное вещество костной ткани по химическому составу близко к минералу гидроксилапатиту ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$). Однако изучение минерального компонента требует более серьезных методических подходов для понимания процессов постмортальных изменений [1].

Изучался минеральный компонент костной ткани индивидов из погребений эпох мезолита, неолита, раннего железного века, средневековья и современности. Для диагностики использовались рентгендифрактометрический, термовесовой и кристаллооптический методы. Выявлено присутствие рентгенаморфной модификации фосфата кальция – коллофана. Его состав условно отвечает формуле 3(Ca3(PO4)3).CaCO3. nH2O. Установлено, что с течением времени в минеральных структурах костной ткани происходит кристаллизация, переход от рентгенаморфного к мелкокристаллическому состоянию.

Состояние минеральной части костной ткани информирует о процессах постмортальной трансформации, тафономических изменениях, знание которых важно для реконструкции истории самого археологического памятника. Также следует отметить, что применение кристаллооптических методов зарекомендовало себя как высокоэффективное при изучении нормальных и патологических процессов костеобразования, поэтому актуально для палеопатологических исследований [2].

[1] Добровольская М.В. Минералы костной ткани (по материалам древних погребений) // III Seminar in Petroarchaeology / Plovdiv, Bulgaria. Reports. Plovdiv, 1984, s. 16–23.

[2] Фло Ш., Шультц М. Диагностика заболевания среднего уха в доисторических и исторических группах: данные для интерпретации условий жизни // OPUS. Междисциплинарные исследования в археологии / Отв. ред. А.П. Бужилова. М: ИА РАН, 2008, с. 276–299.

О СОСТАВЕ И ЦВЕТЕ КРАСОК НА РОСПИСЯХ ПЛИТ КАМЕННЫХ ЯЩИКОВ КАРАКОЛА (АЛТАЙ)

Дэвлет Е.Г.[1], Пахунов А.С.[1], Каратеев И.А.[2], Дороватовский П.В.[2], Калоян А.А.[2], Подурец К.М.[2], Благов А.Е.[2], Яцишина Е.Б.[2]
[1] Институт археологии РАН (ИА РАН), Москва
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: eketek@yandex.ru

Среди значимых древностей Алтая эпохи бронзы выделяются погребальные комплексы каракольской культуры, относящиеся к первой трети 2 тысячелетия до н.э. Ярким феноменом является переиспользвание фрагментов камня с наскальными изображениями для сооружения каменных ящиков в подкурганных погребениях. Для оформления погребальной конструкции на плоскостях, обращенных внутрь каменных ящиков, поверх ранее выбитых петроглифов были нарисованы различные выразительные костюмированные персонажи. Они выполнены в смешанной технике с использованием краски, гравировки и пришлифовки.

В НИЦ «Курчатовский институт» исследовался состав и особенности красок: проанализированы 15 образцов пигментов и горных пород с шести могильных плит из Каракола и Озерного, хранящихся в музее Музея народов Сибири и Дальнего Востока ИАЭТ СО РАН. Использовались методы электронной микроскопии с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом, а также рентгеновской дифракции на синхротронном источнике. Установлено, что для росписей применялись красные (охры разного оттенка) и чёрные (сажа) пигменты. Анализ красных красок показал, что их состав в пространстве одного погребения однороден, тогда как в разных захоронениях он отличается.

Исследование прокрашенной полосы с плиты 1 (Каракол, погребение 3, курган 2) позволило установить ее естественное происхождение и обоснованно отказаться от предположения, что она нарисована. Анализ фазового состава материала показал, что основным окрашивающим компонентом является гётит, который представляет собой слой сферолито-подобных частиц. Изучение поперечного сечения образца позволило установить характер распределения вещества на поверхности камня – гётит сформировался в виде плотного слоя, толщиной до 10 мкм.

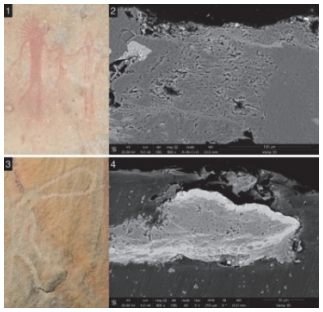
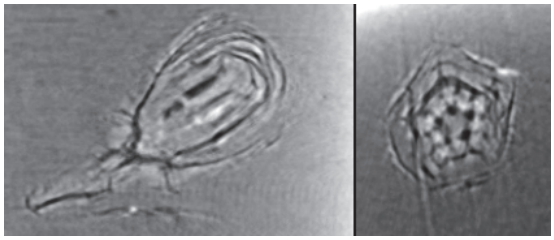


Рис. 1. 1-1 - Каракол, погребение 5, плита 1. Группа фигур, выполненных красной краской; 1-2 – Поперечное сечение образца красной краски с левой фигуры; 1-3 - Каракол. Курган 2, погребение 3, плита 1. Изображение фигуры быкоголового выбито поверх дугообразной полосы бурого цвета; 1-4 – Поперечное сечение образца материала с дугообразной полосы.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАЛЕОНТОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ МЕТОДАМИ СИНХРОТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Коваленко Е.С., Подурец К.М., Калоян А.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: kovalenko_es@mail.ru

На Курчатовском источнике синхротронного излучения были выполнены томографические исследования различных ископаемых (мозговой коробки хищника отряда Carnivora, каменистых костей слуховых капсул позднемиоценовых усатых китов Северо-Западного Предкавказья, растительных включений в янтарях и других). Были выявлены детали внутреннего строения ископаемых, важные для их классификации, результаты некоторых исследований приведены на Рис. 1. На примерах некоторых палеонтологических объектов (растительные включения в янтарях) продемонстрированы преимущества фазоконтрастной томографии с использованием синхротронного излучения. Исследования проводились совместно с ПИН РАН.



а)

б)

Рис. 1. а) продольный и поперечный срезы бутона в ископаемом янтаре, полученные методом фазоконтрастной томографии; б) объемная модель внутренней полости слуховой кости ископаемого китообразного Zigiocetus nartorem.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В ИЗУЧЕНИИ ОБЪЕКТОВ КУЛЬТУРНОГО НАСЛЕДИЯ

Колобылина Н.Н.[1], Терещенко Е.Ю.[1,2], Лобода А.Ю.[1,3], Васильев А.Л.[1,2], Созонтов Е.А.[1], Грешников Э.А.[1], Яцишина Е.Б. [1,2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3] ФГБУК «Государственный исторический музей» (ГИМ)

В углубленном изучении объектов культурного наследия очень важно взаимодействие археологии с естественными науками: физикой, биологией, химией.

Разнообразие предметов культурного наследия – древние тексты, манускрипты, картины, скульптура, металлические артефакты и пр., определяет обширный спектр задач, для решения которых требуется привлечение различных методов исследования, в частности, методы растровой (РЭМ) и просвечивающей (ПЭМ) электронной микроскопии, а также энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭРМ). Это связано с возможностью изучения объектов без их предварительной подготовки, с сохранением образца в исходном состоянии. Современная РЭМ, позволяет получать изображения поверхности с нанометровым разрешением, а применение ЭРМ дает возможность оценить качественно и количественно элементный состав образца и вместе с тем строить карты распределения элементов. При использовании ПЭМ открывается возможность по идентификации кристаллической решетки фаз путем анализа электронограмм.

В работе представлен обзор методов электронной микроскопии и микроанализа, которые использовались в исследованиях ряда объектов культурного наследия, представленных Институтом археологии РАН, Государственным музеем изобразительных искусств им. А.С. Пушкина, Крымским федеральным университетом им. В.И. Вернадского и Государственным историческим музеем.

ИССЛЕДОВАНИЯ НАКОНЕЧНИКА КОПЬЯ ИЗ КУРГАНА КОНЦА IV ТЫСЯЧЕЛЕТИЯ ДО Н.Э. СТАНИЦЫ НОВОСВОБОДНАЯ

Лобода А.Ю.[1], Колобылина Н.Н.[1], Велигжанин А.А.[1], Зубавичус Я.В.[1], Терещенко Е.Ю.[1,2], Шишлина Н.И.[3], Яцишина Е.Б.[1]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3] Государственный исторический музей (ГИМ)

e-mail: lobodaau@mail.ru

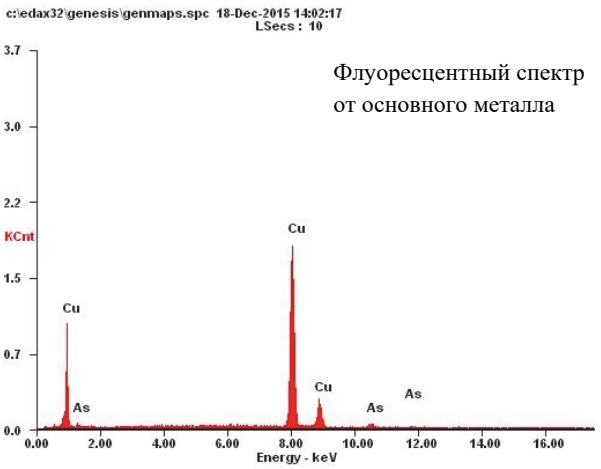
При изучении коллекции, сформированной на основе материалов из раскопок курганов станицы Царской (совр. ст. Новосвободной), проводившихся Н.И. Веселовским в 1898 г., археологами было отмечено наличие темного поверхностного слоя («покрытия») неизвестного происхождения на наконечнике копья. Это привлекло особое внимание хранителей ГИМ, потому что среди находок этого периода известны случаи нанесения на оружие искусственного покрытия. Целью настоящей работы было исследование состава основного материала копья и его покрытия, а также, по возможности, определение структуры и происхождения покрытия.

Для исследования элементного состава и микроструктуры покрытия наконечника копья, в месте естественного нарушения целостности покрывного слоя были взяты образцы. Для определения основного состава металла изделия были взяты пробы стружки металла из мест сверления черенкового насада наконечника копья предыдущими исследователями. Изучение образцов проводилось методом фазового анализа на Курчатовском источнике синхротронного излучения и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа на сканирующем электронно–ионном микроскопе HELIOS NANOLAB 600I.

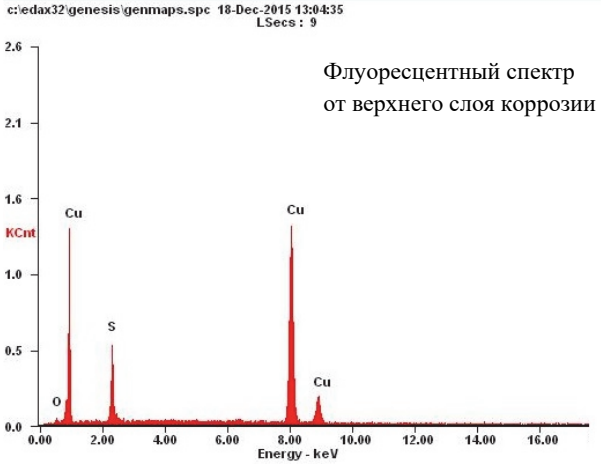
Преобладающим минералом в составе предполагаемого «покрытия» оказался халькозин. По результатам исследований была составлена стратиграфия коррозионных слоев и определена локализация предполагаемого «покрытия». Химический состав основного металла наконечника копья – медно-мышьяковый сплав (Cu-95.9%, As-4.1% (At.). Медно-мышьяковый сплав в хорошей сохранности и окружен слоем закиси меди. Последовательность расположения слоев медной коррозии сохранена и не искажена. Выше слоя Cu_2O расположены хлориды и карбонаты, на которых лежит слой предполагаемого «покрытия». Из этого следует, что источником «покрытия» послужил не основной металл наконечника, а один из коррозионных слоев.

Следует отметить, что медно-мышьяковые орудия, помещенные в гробницу в IV тысячелетии до н.э. оказались в очень специфических условиях: глубокое залегание захоронения в почве, отсутствие заполнения погребальной камеры грунтом, анаэробные условия, а также обилие сероводорода сформировали в гробнице специфическую среду, определившую ход развития коррозионного слоя на поверхности предметов. В результате постоянного контакта с сероводородом сульфаты на поверхности бронзовых орудий (один из самых распространенных видов коррозии медных сплавов) перешли в минеральные сульфиды.

Подтверждением данного предположения было обнаружение на других бронзовых орудиях из изучаемой гробницы участков, аналогичных по своим визуальным характеристикам и химическому составу исследуемому покрытию.



Флуоресцентный спектр от основного металла



Флуоресцентный спектр от верхнего слоя коррозии

Таким образом, проведенные анализы позволяют говорить о слое сульфидного покрытия не как о частном случае искусственной отделки или коррозии наконечника копья, а как о специфической коррозии, характерной для предметов из раскопок кургана станицы Царской (совр.ст.Новосвободная), что привело нас к выводу о естественном характере этого слоя «покрытия».

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ЧЕРНИ ДРЕВНЕРУССКИХ КРЕСТОВ-ЭНКОЛПИОНОВ И КРЕСТА-ТЕЛЬНИКА ДОМОНГОЛЬСКОГО ПЕРИОДА ИЗ РАЙОНА СУЗДАЛЬСКОГО ОПОЛЬЯ

Макаров Н.А.[1], Зайцева И.Е.[1], Ковальчук М.В.[2,3], Яцишина Е.Б.[2,3], Грешников Э.А.[2], Терещенко Е.Ю.[2,3], Колобылина Н.Н.[2], Велигжанин А.А.[2], Дороватовский П.В.[2], Демкив А.А.[2], Кондратьев О.А.[2]

[1] *Институт археологии РАН (ИА РАН)*

[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*

[3] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

e-mail: MakarovNA@iaran.ru

Новые находки предметов христианского культа X–XII вв. расширяют перспективы изучения религиозного мира средневековой Руси. Украшенные чернью древнерусские кресты-энколпионы из Суздальского Ополья, обнаруженные исследованиями экспедиции ИА РАН, изучены в НИЦ «Курчатовский институт» с помощью методов рентгеновской дифракции и РФА-картирования на синхротронном источнике, рентгеновской флуоресценции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии. Комплексная методика в отличие от проводимых за рубежом аналогичных реконструкций древних способов чернения [1] дополнена методом РФА-картирования (распределения химических элементов по поверхности образца с черневым рисунком), позволяющим уточнить рецептуру изготовления черни при выявленной неоднородности ее состава. Впервые в России установлены рецепты древнерусских мастеров домонгольского времени по созданию бронзовых украшений с употреблением черневой массы, при изготовлении которой использовались смеси сульфидов меди, свинца и олова.

Рис.1. Карта распределения олова (Sn) на поверхности створки креста-энколпиона из Чернижа, демонстрирующая меньшие концентрации этого элемента (черный цвет) в составе черни (метод РФА-картирования) в сравнении с металлом изделия.

[1] Northover P., La Niece S. New thoughts on niello / From Mine to Microscope - Advances in the Study of Ancient Technology. Shortland A.J, Freestone Ian Charles and Rehren T., eds. 2009. Oxford: Oxbow. P. 260-282., Niece S., Niello: A historical and technical survey // The Antiquaries Journal. Vol. 63. No. 2. Oxford. University Press. L., 1983. P. 279-297.

ИЗДЕЛИЕ ИЗ КОСТИ ИЗ РАСКОПОК ПОСЕЛЕНИЯ АНТИЧНОГО ВРЕМЕНИ ДУБКИ ПО ДАННЫМ РАДИОЛОГИИ, ТРАСОЛОГИИ И ГЕНЕТИКИ

Малышев А.А., Александрова О.И., Медникова М.Б.

Институт археологии РАН (ИА РАН)

e-mail: maa64@mail.ru

В раскопках археологических памятников важным источником информации служат костные останки человека и животных. Особый интерес представляют костяные артефакты со следами обработки. Несравненно более редкой находкой, чем предметы из костей диких или домашних животных, являются изделия, изготовленные из человеческих останков.

Исследованию был подвергнут артефакт, представляющий собой обработанную плоскую кость, предположительно взятую из свода черепа. Он обнаружен внутри каменного основания башнеобразного сооружения – своеобразного сторожевого боспорского поста в предгорьях Северо-Западного Кавказа. Изделие подокруглой формы, диаметром до 59 мм, в центральной части которого расположено высверленное отверстие округленных очертаний размерами примерно 4 × 5 мм.

Помимо традиционной описательной методики из арсенала судебно-медицинских и палеоантропологических исследований авторы прибегли к современному методу радиологического анализа. Была выполнена компьютерная томография с высоким разрешением. В итоге доступными для изучения оказались 238 поперечных срезов объекта (шаг исследования 0,6 мм). Была выстроена трехмерная модель, позволившая проявить некоторые детали строения костной поверхности. Изученный фрагмент своеобразен с точки зрения нормальной «человеческой» анатомии. Однако результаты палеогенетического исследования подтвердили принадлежность этой кости *Homo* – мужчине с гаплогруппой R1b (Y-хромосома, отцовская линия) и U (митохондриальная ДНК, материнская линия). Современные представители этой гаплогруппы в наибольшей степени распространены на западе Европейского континента (в ареале кельтских традиций): особенно высок процент ее носителей среди народов Северной и Западной Англии (до 90% и более). Судя по всему, фрагмент краниума был удален посмертно, но костная ткань сохранила пластичность на момент ее обработки. Трасологический анализ установил, что полученная в результате костная пластинка подверглась шлифовке и полировке, в том числе с использованием абразивов. С помощью металлографического микроскопа с увеличением до 200 раз установлено, что высверленное отверстие в центре использовалось для подвешивания.

Обладатель данного черепа дожил до взрослого состояния и, можно предположить, отличался специфическим поведением. Это отчасти объясняет, почему свод его черепа был использован для изготовления ритуальной подвески.

Широкий круг аналогий находкам из одного из периферийных районов Боспорского государства – вышеописанному ритуальному амулету, элементам костюма (фибула) и защитного вооружения (панцирные пластины), а также игральная кость – свидетельствует о

высокой интенсивности культурно-этнических контактов во всей античной ойкумене на рубеже эр.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ МУЗЕЙНЫХ АРТЕФАКТОВ ИЗ КЕРАМИКИ. ПРАКТИЧЕСКИЙ ОПЫТ

Минина Е.О.
Государственный музей изобразительных искусств им. А.С. Пушкина
e-mail: e_minina@mail.ru

Одна из основных проблем использования естественно-научных методов в решении вопросов и задач гуманитарных областей – отсутствие взаимопонимания между «физиками и лириками». Наша общая задача – научиться превращать абстрактные цифры, полученные в результате исследований, в описания исторических событий.

Исследования музейных артефактов, делятся на две основные группы: предреставрационные, которые проводятся с целью определения состояния музейного памятника; и, так называемые, технико-технологические, описывающие особенности авторских материалов и технологий изготовления изучаемых предметов.

В течение последних 10 лет ГМИИ им. А.С. Пушкина, совместно с Всероссийским художественным научно-реставрационным центром им. ак. И.Э. Грабаря, проводили предреставрационные физико-химические исследования керамических объектов, хранящихся в Отделе Искусства и Археологии Античного Мира. Были изучены предметы из керамики, принадлежащие этрусской, южноиталийской, кипрской и сицилийской культурам.

На первых этапах этой совместной работы были изданы методические рекомендации «Использование научных методов в реставрации античной керамики». Как правило, в работе участвуют три заинтересованные стороны: хранитель-искусствовед, реставратор, работающий с конкретными вещами и исследователь, владеющий комплексом естественнонаучных методов.

Практика показывает, что для полноценного анализа получаемых результатов исследований необходимо создавать базы данных различных видов материалов или использовать уже созданные в мировой практике, при условии их стандартизации. При этом появляется реальная возможность определить принадлежность предмета к определенному временному периоду и географическому региону, а также установить подлинность предмета и определить наличие поздних реставраций, а, возможно, и мастерские, их проводившие.

АНАЛИЗ МИНЕРАЛОВ В СТРОИТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛЕ ДРЕВНЕГО ХРАМОВОГО КОМПЛЕКСА МИШОН (ВЬЕТНАМ)

Пахневич А.В.[1], Велигжанин А.А.[2], Зайцева Л.В.[1], Калоян А.А.[2], Коваленко Е.С.[2], Нгуен Куок Ши[3], Подурец К.М.[2]
[1] Палеонтологический институт им. А.А. Борисяка РАН
[2] НИЦ «Курчатовский институт»
[3] НИУ «Московский энергетический институт»
e-mail: alvpb@mail.ru

Древний храмовый комплекс Мишон во Вьетнаме возведен в период с IV по XIII век н.э. и входит в Список всемирного наследия ЮНЕСКО. В настоящее время 50 из 71 строения разрушены.

Строения храмового комплекса Мишон

Ранее осуществлялись попытки изучить и восстановить их [1, 2]. В составе кирпичей выявлены минералы: каолинит, иллит, монтмориллонит, кварц, калиевые полевые шпаты, плагиоклазы, слюды, амфиболы [2]. Температура обжига кирпичей предполагалась в диапазоне 540 – 1000°C.

В задачи нашей группы входило изучение минерального состава кирпичей и восстановление температуры их обжига. Изучение проводилось с помощью ИК Фурье спектрометрии на приборе Jasco FT/IR-4100 (ПИН РАН) и рентгеновской дифрактометрии на станции «Структурное материаловедение» в НИЦ «Курчатовский Институт».

В результате исследования в кирпичах были обнаружены минералы: каолинит, метакаолинит, кварц, иллит, калиевые полевые шпаты, альбит, мусковит, монтмориллонит и гетит. Переход каолинита в метакаолинит происходит при t = 520 – 590°C. Дегидратация иллита и монтмориллонита начинается при 800 – 850°C, но в исследованных минералах она не произошла. Не обнаружены силлиманит и муллит, образующиеся из метакаолинита при температуре более 600°C. Загадкой остается отсутствие гематита, в который переходит гетит при температуре 180°C.

Итак, мы подтвердили присутствие в кирпичах ранее обнаруженных минералов; выявили, что температуры обжига кирпичей находилась в диапазоне 200 – 550°C.

[1] Skibinski S. // Recherches sur les monuments du Champa: Rapport de la Mission polono-vietnamienne 1981–1982, 1985, p. 30-45.

[2] Binda L., Tedeschi C., Condoleo P. // 7th Conference of ICCE, 2006, p. 1-9.

ИЗУЧЕНИЕ СОСТАВА СКОПЛЕНИЙ ОХРЫ ИЗ КАПОВОЙ ПЕЩЕРЫ

Пахунов А.С.[1], Житенев А.С.[2], Калоян А.А.[3], Подурец К.М.[3], Дороватовский П.В.[3], Грешников Э.А.[3], Яцишина Е.Б.[3], Дэвлет Е.Г.[1], Ковальчук М.В.[3]

[1] Институт археологии РАН (ИА РАН), Москва

[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, кафедра археологии

[3] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: science@pakhunov.com

Капова пещера – важнейший памятник верхнего палеолита на Южном Урале, на стенах и сводах которой сохранились изображения, выполненные различными по цвету красками. В разных залах на полу пещеры также выявлены скопления красочной массы разного оттенка (так называемые клады охры), фрагментны известняка со следами перетирания краски (так называемые палитры), а в культурном слое залов Купольного и Рисунков – пигменты.

В НИЦ «Курчатовский институт» проанализировано 10 образцов пигментов из 8 точек внутри пещеры. Это образцы скоплений: К040 (зал Хаоса, 2014); К050, К080-82 (зал Хаоса, 2015); материалы из культурного слоя К030 (зал Купольный, 2010); К090 (зал Рисунков, 2015); образцы «капель» краски вблизи панно «Лошади и Знаки» (К070, К075) и др. Использованные методы: рамановская спектроскопия, электронная микроскопия с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом, а также рентгенодифракционный анализ на синхротронной станции «Белок».

Сравнительный анализ красочных материалов позволил выделить две группы: к первой относятся пигменты К030 и К090, подвергавшиеся тепловой обработке. Ко второй – образцы К040, К050 и К080-82. Образец пигмента, связанный с «Палитрой № 2», неоднороден по составу и содержит гематит и гётит разной степени кристаллизованности, что может свидетельствовать о кратковременной тепловой обработке руды и последующем перемешивании материала в процессе перетирания. Образцы первой группы показали, что для приготовления красочной массы использовался природный гематит, который смешивался с глиной и, возможно, с кальцитом, а затем измельчался. Материалы второй группы указывают на термическую обработку гётит-содержащей руды. Полученные данные согласуются с результатами анализа пигментов с изображений.

ИЗУЧЕНИЕ БРОНЗОВЫХ АРТЕФАКТОВ С ПОМОЩЬЮ НЕЙТРОННОЙ И СИНХРОТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Подурец К.М.[1], Глазков В.П.[1], Коваленко Е.С.[1], Мурашев М.М.[1], Грешников Э.А.[1], Говор Л.И.[1], Расторгуев В.А.[2], Тулубенский М.Г.[2], Макаров Н.А.[3], Терещенко Е.Ю.[1,4], Кашкаров П.К.[1], Яцишина Е.Б.[1,4]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ГМИИ им. А.С. Пушкина

[3] Институт археологии РАН (ИА РАН)

[4] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: Podurets_KM@nrcki.ru

В НИЦ «Курчатовский институт» исследованы бронзовые артефакты, имеющие высокую историческую и художественную ценность. Исследованы крест – энколпион (XII – XIII вв., ИА РАН), бронзовые статуи Танцующего амура и Иоанна Крестителя (XIV – XV вв., ГМИИ им. А.С. Пушкина). Ставилась задача определения состояния металла, в том числе наличия скрытых дефектов, коррозии, технологических элементов литейных форм и др. Для креста интерес заключался в изучении его содержимого, так как он мог использоваться для хранения реликвии. Статуи были подвержены пожару, и необходимо определить их повреждения.

Были применены методы радиографии и томографии с использованием нейтронов и синхротронного излучения на реакторе ИР-8 и Курчатовском источнике синхротронного излучения: крест-энколпион исследовался методами синхротронной и нейтронной томографии, статуя Танцующего амура была исследована с помощью нейтронной томографии, для статуи Иоанна Крестителя из-за ее размеров были получены только нейтронные радиограммы.

Для креста получены изображения, на которых выявляются внутренняя полость креста и ее содержание. Крест, по-видимому, заполнен в основном грунтом. Наблюдаются неоднородности металла, связанные с окислением металла, а также с дефектами литья (Рис.1).

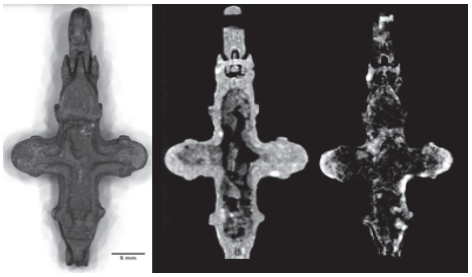
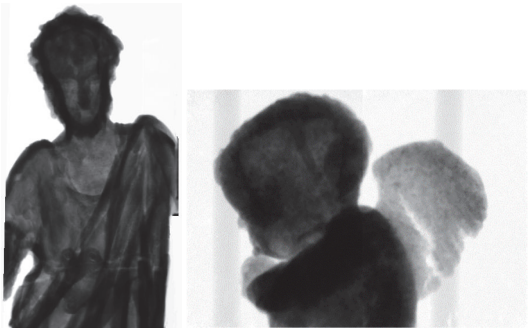


Рис.1. Изображения креста: фотография, томографический срез (нейтронные исследования), распределение коррозии.

Для статуй были выявлены элементы внутреннего строения, определено состояние металла, наличие коррозии и других повреждений (Рис.2.). Полученные данные будут использованы при реставрации статуй.



а б

Рис. 2. Нейтронные радиограммы фрагментов статуй Иоанна крестителя (а) и Танцующего амура (б).

Таким образом, в НИЦ КИ были получены данные о строении и состоянии бронзовых артефактов. Возможность применения взаимодополняющих нейтронно-синхротронных методов существенно расширяет информативность проводимых исследований.

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ СТЕКЛА И РЕМЕСЛЕННЫЕ ТРАДИЦИИ ПОЗДНЕАНТИЧНЫХ ЭМАЛЬЕРОВ В ВОСТОЧНОЙ ЕВРОПЕ (ПО МАТЕРИАЛАМ БРЯНСКОГО КЛАДА)

Румянцева О.С.[1], Трифонов А.А.[2], Ханин Д.А.[3]
[1] *Институт археологии РАН (ИА РАН)*
[2] *ООО «ОПТЭК»*
[3] *МГУ им. М.В. Ломоносова, геологический факультет*
e-mail: o.roumiantseva@mail.ru

Основу клада конца II – III в., найденного на юге Брянской области, составляют изделия, изготовленные в стиле восточноевропейских выемчатых эмалей. Цель исследования – изучение ремесленных традиций эмальеров, производивших украшения в данном стиле. Основные задачи исследования – реконструкция техники выполнения эмалевых вставок; определение «рецепта» изготовления и окрашивания стекла, сырьевых материалов и приемов, использованных мастерами; сопоставление полученных данных с итогами изучения аналогичных видов стекла и эмалей, происходящих как с территории Римской империи, где известны производственные центры, так и из Восточной Европы. Химический состав эмалей изучался методами SEM-EDS (Carl Zeiss/Oxford Instruments, ФГБНУ «НИИГБ») и WDS (Camebax SX 50, кафедра минералогии геологического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова).

В итоге установлена связь между цветом стекла и рецептом его изготовления. Если голубое и зеленое стекло варилось на основе природной соды, то красное и оранжевое имело состав, типичный для стекла зольного. Это обусловлено, вероятно, не разницей в основном сырье, а особенностями технологии окрашивания, связанными со спецификой цветообразования в некоторых стеклах. Наличие сильной корреляции между содержаниями меди, олова и цинка в красном и оранжевом стекле позволяет предполагать, что источником красителя для него были многокомпонентные медные сплавы, широко представленные в материальной культуре населения Европы в изучаемую эпоху. Различия в концентрациях свинца, влияющего на температуру обработки стекла, помогли восстановить технику и последовательность заполнения гнезд эмалями разных цветов. По химическому составу эмали Брянского клада наиболее близки к украшениям римской Британии. Комплекс химико-технологических данных позволяет предполагать, что они были изготовлены при участии провинциально-римских мастеров.

Исследование проведено в рамках проекта РГНФ (№ 14-01-00269а).

ВОЗМОЖНОСТИ, ОГРАНИЧЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ ПРЕДМЕТОВ ИЗ ЦВЕТНОГО И ЧЕРНОГО МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Сапрыкина И.А.[1], Кичанов С.Е.[2], Козленко Д.П.[2]
[1] *Институт археологии РАН (ИА РАН), Москва*
[2] *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*
e-mail: dolmen200@mail.ru

Нейтронная томография – относительно новый метод исследования археологических объектов из цветного и черного металлов, позволяющий определять степень сохранности объекта, выявлять его конструктивные элементы, структурные особенности и т.д. Различия в полном сечении поглощения нейтронов для разных элементов позволяют визуализировать распределение неоднородностей и получить их трехмерную модель. Метод нейтронной томографии применяется при реконструкции техник изготовления анализируемых объектов, определении участков развития коррозии или изменений во внутренней структуре материала; при визуализации отдельных элементов внутри исследованных объектов [например, 1-4].

Методом нейтронной томографии выполнено исследование следующих объектов: золотого сарматского сосуда-флакона из могильника Чеботарев 5; древнерусских серебряных украшений из состава Тверского клада 2014 г.; древнерусской железной булакери из раскопок в Великом Новгороде; монет из раскопок античной Фанагории. Поставлена задача получить изображения, скрытые под слоем коррозии (булакерь, монеты); получить данные о конструктивных элементах и наличии покрытия (украшения, сосуд-флакон).

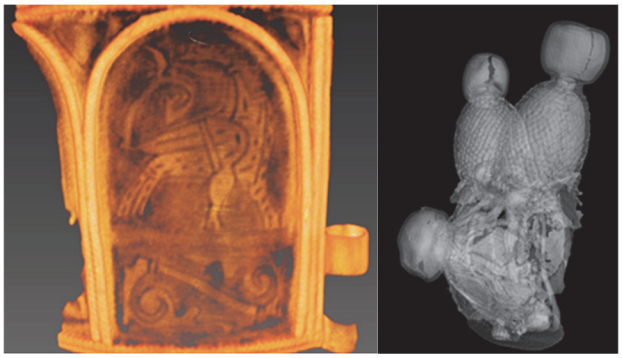
Исследования выполнялись на специализированной экспериментальной станции нейтронной томографии и радиографии, на 14-м канале импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ. Методика исследования опубликована [5].

Для решения поставленных задач проведены серии нейтронных радиографических экспериментов, в ходе которых получены наборы угловых проекций для всех исследуемых предметов. Из полученных наборов проекций восстановлена трехмерная модель для каждого объекта.

В результате удалось получить данные по наличию участков с чернением и позолотой на древнерусском браслете из состава Тверского клада 2014 г. и определить его отношение к киевской ювелирной школе; для звездчатого колта из состава этого же клада впервые получены данные по его внутренним конструктивным элементам, что позволяет детально реконструировать технику его изготовления и этапность сборки (рисунок). Удачные результаты получены при исследовании золотого сосуда-флакона, внутри которого выявлены остатки заполнения; также определены толщина золотого листа, использовавшегося при изготовлении сосуда, и его конструктивные элементы.

Однако при исследовании монет и железной булакери, где необходимо было получить данные о наличии изображений, таковые не выявлены. Вероятно, этому мешает слой коррозии; в то же время получены данные о

степени сохранности объекта (монеты) и об участках с наибольшим напряжением металла (?) (булакерь). В любом случае эти результаты требуют дальнейшего обсуждения.



Авторы исследования выражают свою искреннюю признательность П.Г. Гайдукову, В.Д. Кузнецову, А.Н. Хохлову и Р.А. Мимоходу (ИА РАН) за предоставленные для работы объекты из археологических раскопок.

[1] Kasztovszky Z., Belgya T., Kis Z., Szentmiklosi L., 2011. New developments in neutron radiography // Nuclear Techniques for Cultural Heritage Research. IAEA Radiation Technology Series No. 2. Vienna, p. 121 – 128.

[2] Lehmann E.H., Deschler-Erb E., Ford A. Neutron tomography as a valuable tool for the non-destructive analysis of historical bronze sculptures. Archaeometry, 52, 2, 272–285 (2010).

[3] Harvig, L., Lynnerup, N., and Ebsen, J.A. (2012), Computed Tomography and Computed Radiography of late bronze age cremation urns from Denmark: an interdisciplinary attempt to develop methods applied in bioarcheological cremation research, Archaeometry, 54: 369-387.

[4] Mannes D., Schmid F., Frey J., Schmidt-Ott K., Lehmann E., Combined neutron and X-ray imaging for non-invasive investigations of cultural heritage objects, Physics Procedia, 69, 653 (2015)

[5] Searf V.F. Neutron scattering lengths and cross sections, Neutron News, Vol. 3, No. 3, 1992, pp. 29-37.

ЭВОЛЮЦИЯ СОСТАВА СПЛАВОВ МОНЕТ АНТИЧНЫХ ГОСУДАРСТВ ПРИЧЕРНОМОРЬЯ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНО-ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Смекалова Т.Н.[1,2], Дюков Ю.Л.[3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Крымский Федеральный Университет им. В.И. Вернадского

[3] Институт всеобщей истории РАН, Москва

e-mail: tnsmek@mail.ru

В докладе обобщаются результаты исследования состава сплавов монет городов Причерноморья VI в. до н.э. – IV в. н.э. из собрания Государственного Эрмитажа. Главная цель работы – изучение раннего процесса превращения монеты полной металлической стоимости в монету условной стоимости. С помощью рентгено-флуоресцентного анализатора «АР-104» («Геологоразведка»), определялась массовая доля Cu, Pb, Zn и Au.

Выводы. На начальном этапе античные причерноморские государства выпускали только монеты полной металлической стоимости: золотые, серебряные, электровые, бронзовые. В начале IV в. до н.э. при Левконе I впервые на Боспоре были выпущены кредитные серебряные монеты, номинальной стоимостью вдвое превышающей стоимость их металла. Время эллинизма в Причерноморье характеризуется сосуществованием полновесной монеты для международных расчетов с кредитной монетой, имеющей хождение только внутри государств. Первыми монетами условной стоимости из «чистой» меди были т.н. понтийские анонимные оболы, выпущенные в Понте в начальный период правления Митридата VI (120-89 гг. до н.э.). При этом же царе в разросшейся понтийской державе, включающей Боспор, впервые в древнем мире, с 89/88 гг. до н.э., зафиксировано применение разных сплавов на медной основе (бронзы, «чистой» меди и цинка) для чеканки условных монет различных номиналов. В I в. до н.э. это изобретение спорадически применялось в римской республиканской чеканке, а со времени Августа получило широчайшее распространение по всей Римской империи, включая провинции. В первых вв. н.э. боспорский статер, оставаясь неизменным по весу и типам, превращался из полновесной золотой монеты в монету условной стоимости за счет ступенчатого (с приходом каждого нового правителя) снижения содержания вначале золота, замещаемого серебром (рис. 1-2), затем серебра, вытесняемого медью. В 227-233 гг. н.э. из боспорских статеров полностью исчезает золото, а в 266-285 гг. – серебро, и статеры чеканятся из дешевых медных сплавов без соблюдения определенной рецептуры.

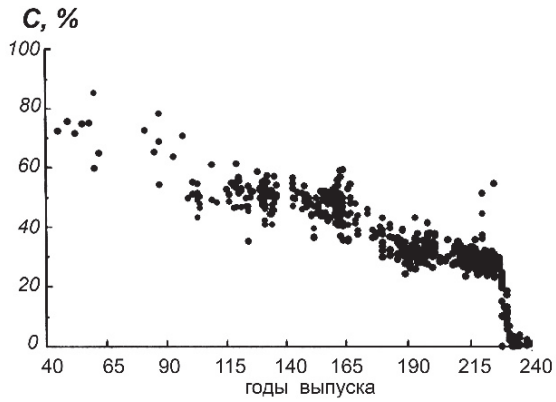


Рис. 1. Зависимость содержания золота в боспорских статерах 40-240 гг. н.э. от года выпуска.

Рис. 2. Боспорские статеры 104/105 г. и 236/237 г.

Работа подготовлена при поддержке гранта РНФ № 15-18-30047 «Крымская Скифия в системе культурных связей между Востоком и Западом (III в. до н.э. - VII в.н.э.)».

ДРЕВНИЕ ПЕРГАМЕНТЫ: ДИАГНОСТИКА СТРУКТУРЫ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ФРАГМЕНТОВ РУКОПИСНОГО ТЕКСТА – ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ПОДХОД

Созонтов Е.А.[1], Уханова Е.В.[3], Чистякова М.В.[3], Яцишина Е.Б.[1,2], Ковальчук М.В.[1,2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3] ФГБУК «Государственный исторический музей»

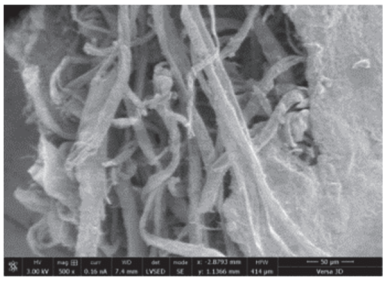
e-mail: sozontov_ea@nrcki.ru

Применение естественнонаучных методов в настоящее время становится совершенно необходимым в практике гуманитарных исследований [1]. Следует отметить, что в последние годы наибольшую динамику развития для изучения и научной экспертизы объектов культурного наследия демонстрируют методы и аналитические инструменты, основанные на взаимно дополняющем использовании современных источников синхротронного излучения и нейтронных источников [2].

Цель данной работы состояла в комплексном изучении состояния и степени деградации древних пергаментов, а также в развитии метода цифровой рентгеновской визуализации фрагментов текста, в том числе угасшего или стертого, средневековых пергаментных рукописей.

Пергамент является уникальным природным наноструктурированным материалом, обладающим высокой прочностью благодаря особой иерархической организации молекул фибриллярного белкового коллагена, составляющего его основу. Сохранность этих исторических носителей информации зависит от многих факторов окружающей среды и условий хранения: температуры, влажности, освещения и др. и определяется, прежде всего, степенью деградации коллагена на любых уровнях его структурной иерархии.

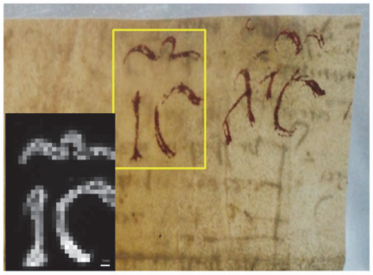
Мы применяем мультидисциплинарный подход к пониманию деградации коллагена, используя комплекс неразрушающих аналитических методов (оптическая микроскопия, растровая электронная микроскопия, малоугловая/широкоугловая (SAXS/WAXS) рентгеновская дифракция и рассеяние на синхротронном излучении), способных к анализу различных уровней структурной иерархии.



Измерения проводились на станциях: ДИКСИ, МЕДИАНА, БЕЛОК Курчатовского источника синхротронного излучения, а также в ресурсных центрах Курчатовского комплекса НБИКС-технологий. Полученные экспериментальные данные позволяют сделать выводы, в частности, о процессе желатинизации коллагена и, как следствие, деградации коллагеновой структуры пергамента в некоторых образцах. Такие интегральные оценки степени сохранности структуры пергамента являются важными характеристиками для мониторирования состояния объекта в целом, а также для совершенствования процессов реставрации, консервации и хранения пергаментных рукописей.

Большой исторический интерес вызывает возможность чтения древних угасших рукописей, а также рукописей, подвергшихся стиранию и переписыванию [3]. Поскольку чернила проникают в пергамент достаточно глубоко и в своем составе часто содержат тяжелые элементы: железо, ртуть, свинец и др., то при использовании высокоинтенсивного синхротронного излучения, вызывающего рентгеновскую флуоресценцию этих элементов, сигнал от которой может быть зарегистрирован современным полупроводниковым детектором, открывается уникальная возможность неразрушающего анализа элементного состава древних чернил, а также рентгеновской цифровой визуализации скрытого или угасшего исторического текста. Фрагмент средневекового пергамента с рукописным текстом с обеих сторон был предоставлен для исследований Государственным историческим музеем. Эксперимент осуществлялся на станции рентгенофлуоресцентного анализа РЕФРА Курчатовского источника синхротронного излучения.

В результате выполненной работы, проведено элементное картирование фрагмента текста, написанного чернилами красного цвета на древнем пергаменте. Определен элементный состав чернил красного цвета, на основе которого сделано заключение, что основным типом чернил, которым был написан текст, являлся свинцовый сурик *(minium)*.



Показано полное соответствие фрагмента текста, написанного красными чернилами с его изображением в рентгеновском диапазоне длин волн, и доказана возможность с помощью синхротронного рентгенофлуоресцентного излучения чтения угасших (стертых) фрагментов рукописного текста на пергаменте.

Работа выполнена в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» и ФГБУК «Государственный исторический музей» от 13 марта 2015 г.

[1] Материалы совещания-семинара «Естественнонаучные методы в гуманитарных науках», Москва, 13 марта 2015 г., НИЦ «Курчатовский институт». – М., 2015. 104с.

[2] L.Bertrand, P.Dillmann and I.Reiche, Synchrotron radiation and neutrons in art and archaeology 2014. // J.Anal.At.Spectrom., 2015, Vol. 30, p. 540–541.

[3] Proceedings of the “Conference on Natural Sciences and Technology in Manuscript Analysis” (University of Hamburg, 4–6 December 2013. // Manuscript Cultures №5, 2013.

КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНЫМИ МЕТОДАМИ ИТАЛЬЯНСКОЙ МАЙОЛИКИ XV ВЕКА ИЗ КОЛЛЕКЦИИ ГМИИ ИМ. А.С. ПУШКИНА

Терещенко Е.Ю.[1,2], Лобода А.Ю.[1], Колобылина Н.Н.[1], Чарушникова Д.[1], Велигжанин А.А.[1], Зубавичус Я.В.[1], Пожидаев В.М.[1], Ретивов В.М.[3], Минина Е.О.[4], Яцишина Е.Б.[1,2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3] ИРЕА НИЦ «Курчатовский институт»

[4] Государственный музей изобразительных искусств им. А.С. Пушкина (ГМИИ им. А.С. Пушкина)

e-mail: helena.tereschenko@gmail.com

В данной работе рассматриваются результаты исследования барельефа итальянской майолики «Мадонна с Младенцем на руках» («Мадонна Фридрихштайн») из коллекции ГМИИ им. А.С. Пушкина, предположительно относящейся к XV веку. Из описания экспоната известно, что он был обнаружен после пожара в хранилище.

Целью проведенных исследований было определение состава глазури и ее цветообразующих элементов в различных цветовых зонах, а также, изучение зон с изменением цвета глазури.

Отбор микрообразцов глазури проводился в местах нарушения целостности барельефа. Это ограничило зоны исследований базовыми цветовыми зонами – белой, синей, зеленой; и областью изменения цвета белой глазури.

Хроматографический и элементный анализ смывов загрязнений с поверхности барельефа для идентификации соединений показали, что в экстрактах присутствуют сложные эфиры жирных спиртов и уксусной кислоты, т.е. обусловлены, в основном, конденсацией продуктов пиролиза на их поверхности.

Для изучения элементного и фазового состава проб были проведены синхротронные и электронно-микроскопические эксперименты на исследовательской базе НИЦ «Курчатовский институт».

Обнаруженная стратиграфия расположения элементов в слоях глазури определяется технологией нанесения и окраски глазури.

Дальнейший минералогический и элементный сравнительный анализ глиняной основы и глазури в сочетании с искусствоведческими исследованиями будет использован для определения возможного автора скульптуры [1].

[1] A. Zucchiatti, A. Bouquillon, I. Katona, A. D’Alessandro. Use of cobalt pigments in ceramics during the Italian renaissance // Archaeometry 48, 1 (2006) 131–152.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЛИНЫ В СЛОЖНОСОСТАВНОМ ИЗДЕЛИИ ЭПОХИ БРОНЗЫ ИЗ МОГИЛЬНИКА БЕРЁЗОВЫЙ РОГ

Азаров Е.С.[2], Пожидаев В.М.[1], Шишлина Н.И.[2], Яцишина Е.Б.[1]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *ФГБУК «Государственный исторический музей»*
e-mail:hazari4@yandex.ru

Керамика и керамические предметы из обожженной глины с древнейших времен занимают одно из главных мест в жизни человека. Изделия из необожженной глины в силу своей хрупкости и губительного воздействия влаги не имели столь значительного распространения. Одно из возможных свидетельств их наличия – уникальный сложносоставной предмет, обнаруженный в погребении второй четверти II тыс. до н.э. поздняковской археологической культуры на территории современной Рязанской области. Находка состояла из бересты, ткани и верхней детали в виде темно-коричневого материала, инкрустированного семенами.

Задача исследования – определение природы верхней части этого изделия. Для этого использовались метод газовой хроматографии и рентгенофлуоресцентный анализ. Полученные результаты позволили определить, что верхняя часть объекта изучения представляет собой глину, смешанную с жиром мелкого рогатого скота. Сам же предмет реконструируется в виде берестяного туеска, обтянутого полотняной тканью, с нанесенной поверх сырой, необожженной глиной с жиром, в которую были инкрустированы семена Lithospermum. Наличие среди «слоев» этого изделия сохранившихся органических остатков ткани, бересты и семян исключает его обжиг. Твердость и сохранность глиняного сухого слоя необожженной глины определяется добавлением в его состав жира, что защитило изделие от воздействия влаги и, как следствие, разрушения.

Исследования выполнены в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между ФГБУ «Научно-исследовательский центр “Курчатовский институт”« и ФГБУК «Государственный исторический музей» от 13 марта 2015 г. на оборудовании Ресурсных центров «Молекулярной и клеточной биологии» и «Лабораторных рентгеновских методов» комплекса НБИКС-технологий, НИЦ «Курчатовский институт».

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ ИЗ КРЫМСКИХ ПАМЯТНИКОВ

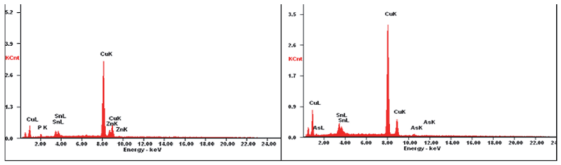
Антипенко А.В.[1], Колобылина Н.Н.[2], Лобода А.Ю.[2], Терещенко Е.Ю.[2,3], Мульд С.А.[1], Смекалова Т.Н.[1], Яцишина Е.Б.[2,3]
[1] *Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[3] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: an.antipenko@yandex.ru

Исследованные металлические изделия из археологических раскопок на территории Крыма относятся к двум культурно-хронологическим группам. К первой принадлежит комплект упряжи (удила, псалии, декоративные бляшки и пронизи) предскифского времени (IX–VIII вв. до н.э.). Состав комплекта и обнаружение его не в могиле позволяет условно назвать комплекс «кладом литейщика» и предположить, что он предназначался для переплавки. Ко второй группе относятся изделия из бронзы (монета, подвески, ременные пряжки) и меди (браслет), находившиеся в могиле 182 позднеримского периода (первая половина III в. н.э.) некрополя Левадки.

Целью исследований, проведенных на базе НИЦ «Курчатовский институт», был анализ сплавов разных по происхождению групп изделий. Эти вопросы исключительно важны для выяснения особенностей металлообработки Крыма и определения ее места в контексте культурно-производственных традиций Юга Восточной Европы и Северного Кавказа. Анализ полученных результатов исследований методами энергодисперсионного рентгеновского микроанализа и растровой электронной микроскопии, позволяет выдвинуть ряд предположений о происхождении исследованных предметов.

Основные компоненты сплавов изделий предскифского времени – медь (33–84%) и олово (3–43%) с редкими примесями свинца (0–32.8%). На связь этих сплавов с металлом Северного Кавказа указывает широкая вариабельность состава металлических изделий в содержании олова (3–43%) и наличие мышьяка (0–6%). Металл предметов первой половины III в. н.э. в среднем состоит из меди (41–82%), олова (4–26%) и цинка (около 9%) – здесь наблюдается определенное сходство с изделиями из северопричерноморских городов. Однако в составе металла отдельных предметов превалирует медь (93%), а другие не содержат цинка и близки к сплавам скифской традиции, которая предполагает наличие свинца (около 15.5%) при большом содержании олова.

Продолжение исследований составов металлических предметов из археологических раскопок на территории Крыма позволит археологам уточнить направления торгово-экономических связей полуострова, миграции населения и технологий. Работа выполнена по госзаданию Минобрнауки РФ № 2014/701 «Этнокультурные процессы в Крыму в античности, средневековье и новое время».



СИММЕТРИЯ МОНГОЛЬСКИХ ОРНАМЕНТОВ С ПОЗИЦИИ УЧЕНИЯ «АРГА БИЛИГ»

Бальжанова Ю.В.
Институт физического материаловедения СО РАН
e-mail: nikolsonbtl@rambler.ru

Искусство орнамента в традиционных культурах всегда выходило за рамки простого декорирования. В орнаменте зашифрованы основные представления о мире того или иного народа. Однако семантика орнамента раскрывается лишь с учетом понимания некой мировоззренческой системы, созданной в рамках данной культуры.

Для монголов такой системой служит «арга билиг» – древнее диалектическое учение о взаимодействии двух полярных категорий. Оно напоминает китайскую диалектику (инь и ян). «Арга» означает «действие», или мужское начало, а «билиг» – «мудрость», женское начало [1].

Розетки строятся с помощью вращений вокруг оси симметрии n и зеркальных отражений по плоскостям симметрии m, бордюры – с переносом исходной фигуры вдоль одной оси a, и сетчатые узоры – с переносом фигуры по двум осям – a и b [2].

Если ось зеркального отражения проходит горизонтально, то она относится к «билиг». А вертикальная ось зеркального отражения относится к «арга»

Если вращение вокруг оси проводится по часовой стрелке (по солнцу), то оно относится к типу «арга», против часовой стрелки (по луне) – «билиг».

При создании образа «арга» соблюдаются следующие принципы: общий мотив, единый размер, повторяемость, цвет, ритм и форма предмета, горизонтальный перенос. Двойное вращение и вертикальное отражение также относится к типу «арга» (рисунок), в то время как горизонтальное отражение, вращение против часовой стрелки и скользящее отражение – к типу «билиг».

Три рыбы («арга»).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 15-47-04328.

[1] Белокурова С.М., Семантика монгольского традиционного орнамента в контексте учения арга билиг // Мир науки, культуры, образования. – 2010.

[2] Шубников А.В., Копцик В.А. Симметрия в науке и искусстве – М. Институт компьютерных исследований. – 2004.

СИНХРОТРОННАЯ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ФРАГМЕНТОВ ДРЕВНЕГО РУКОПИСНОГО ТЕКСТА НА ПЕРГАМЕНТЕ

Демкив А.А.[1], Гурьева П.В.[1], Созонтов Е.А.[1], Уханова Е.В.[2], Яцишина Е.Б.[1,3]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[2] *ФГБУК «Государственный исторический музей»*
[3] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: demkiv@gmail.com

Древние пергаментные рукописи являются уникальными объектами материальной культуры. Задачами данного исследования было изучение элементного состава древних чернил и рентгенофлуоресцентная цифровая визуализация фрагментов древнего текста на пергаменте, включая угасшие, скрытые или стертые фрагменты рукописного текста.

Рис.1. а) Оптическая фотография фрагмента древнего пергамента в видимом диапазоне длин волн (желтым цветом выделена область сканирования); б) Реконструированное цифровое рентгенофлуоресцентное изображение, сканируемой области.

Для цифровой визуализации древнего рукописного текста на пергаменте использовался высокоинтенсивный пучок рентгеновского излучения, генерируемого Курчатовским синхротронным источником. В докладе детально описана методика и техника эксперимента. В результате исследований, выполненных методом синхротронного рентгенофлуоресцентного анализа, определен элементный состав древних чернил и пергамента. Сканирование фрагмента древнего рукописного текста коллимированным пучком синхротронного излучения с одновременным детектированием интенсивности сигнала рентгеновской флуоресценции позволило провести элементное картирование выбранного фрагмента рукописи и, как результат, получить цифровое изображение рукописного текста, включая угасший фрагмент, в рентгеновском свете. Следует отметить, что рентгеновское изображение текста хорошо соответствует изображению этого фрагмента на оптической фотографии.

Работа выполнена в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» и ФГБУК «Государственный исторический музей» от 13 марта 2015 г.

ИЗОТОПНЫЙ СОСТАВ МИНЕРАЛЬНОГО И ОРГАНИЧЕСКОГО КОМПОНЕНТОВ АРХЕООСТЕОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Добровольская М.В., Решетова И.К.
Институт археологии РАН (ИА РАН), Москва
e-mail: mk_pa@mail.ru

Данные о соотношении легких и тяжелых стабильных изотопов таких элементов, как углерод, азот, кислород в органической части минерализованных скелетных тканей человека и животных, получаемые при использовании масс-спектрометрии, прочно вошли в практику палеоклиматических и палеодиетологических исследований [1]. В настоящее время проводятся не только реконструкции «усредненного рациона», но и также воссоздаются особенности питания на протяжении относительно коротких периодов (год–два) [2]. Минеральное вещество костной ткани по химическому составу близко к минералу гидроксилапатиту ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$), в состав которого входит некоторое количество карбонатов. Соотношение тяжелых и легких изотопов углерода в минеральной части кости значительно отличается от такового в коллагене – основном структурном белке кости. Это обусловлено различиями в биохимическом пути, которым проходит углерод «пищевой», являющийся частью органических соединений пищи, и «питьевой», получаемый главным образом из питьевой воды.

Проведенное сопоставление данных об изотопных соотношениях углерода в минеральной части кости и эмали указывает на то, что эти данные информативны для палеоэкологических реконструкций, а также позволяют более тонко изучать ландшафтное и геологическое своеобразие территорий, на которых жили люди и животные, останки которых сохраняются в археологических памятниках. Этот подход также информативен для изучения карбонатных новообразований погребенных почв.

[1] Brown T., Brown K. Biomolecular archaeology. Chichester: Wiley-Black, 2011, 312 p.

[2] Lundmark S. Neolithic farmers in Poland. A study of stable isotopes in human bones and teeth from Kichary Nowe in the south of Poland: Master thesis in archaeological science Archaeological Research Laboratory Stockholm University, 2012, 43 p.

СОСТОЯНИЕ И ДЕГРАДАЦИЯ СТРУКТУРЫ СРЕДНЕВЕКОВЫХ ПЕРГАМЕНТОВ

Петерс Г.С.[1], Калоян А.А.[1], Созонтов Е.А.[1], Грузинов А.Ю.[1], Волков В.В.[3], Колобылина Н.Н.[1], Васильев А.Л.[1], Подурец К.М.[1], Уханова Е.В.[2], Яцишина Е.Б.[1, 3]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] ФГБУК «Государственный исторический музей»
[3] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: georgspeters@gmail.com

Одной из важных задач консервации, хранения и реставрации древних пергаментных рукописей является диагностика состояния структуры коллагена, как основы пергамента. Для решения этой задачи в настоящей работе использовались высокочувствительные аналитические методы, основанные на физических явлениях рассеяния и дифракции синхротронного рентгеновского излучения в широком угловом диапазоне, включая область малых углов, а также метод растровой электронной микроскопии.

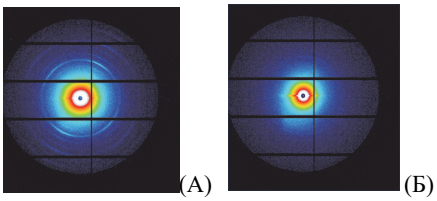

(А) (Б)

Рис.1. Азимутальные распределения интенсивности малоуглового синхротронного рентгеновского рассеяния от образцов древних пергаментов:
Проба (А) «Синод греческий. Минологий» XI в., Византия;
Проба (Б) «Евангелие апракос» XIII в., Болгария.

В качестве примера на Рис.1 приведены данные малоуглового синхротронного рентгеновского рассеяния для двух проб пергамента из коллекции Государственного исторического музея. Широкое диффузное гало на Рис. 1Б свидетельствует о практически полном разупорядочении структуры коллагена Пробы (Б) и необходимости проведения соответствующих реставрационных мероприятий. В то же время, присутствие ярко выраженных рефлексов на Рис. 1А, говорит о высокой степени упорядоченности, а также о двух направлениях укладки коллагеновых фибрилл, что свидетельствует о высокой степени сохранности пергамента Пробы (А).

Работа выполнена в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» и ФГБУК «Государственный исторический музей» от 13 марта 2015 г.

ДРЕВНЯЯ ИСТОРИЯ СРЕДНЕГО ПОВОЛЖЬЯ ЧЕРЕЗ ПРИЗМУ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ МЕТОДОВ

Семыкин Ю.А.

ОГБУ «Научно-исследовательский институт истории и культуры Ульяновской области имени Н. М. Карамзина»

e-mail: semiku@mail.ru

В последнее время в мировой науке стали усиливаться позиции т. н. неоклассической модели исторического исследования, ориентированной на синтез гуманитарных и общественных наук при широком использовании междисциплинарных методов. Археология, в силу специфики источников, а значит и методов, в меньшей мере избежала искушения релятивизма и оказалась в авангарде этого движения гуманитариев к антропологически– и социологически–ориентированному синтезу на базе естественно-научных методов.

Рутиной стало применение радиоуглеродного метода, достижений палинологии, остеологии, почвоведения палеогенетики. Хотя Ульяновская область относится к числу слабо исследованных территорий с точки зрения археологии, с созданием в 2014 г. НИИ истории и культуры Ульяновской области на территории региона начались широкомасштабные археологические раскопки. У нас налажены хорошие рабочие контакты с коллегами из других регионов по всем этим направлениям.

Особо значима для нас проблематика древней металлургии. Уже сейчас можно говорить о существовании в эпоху средневековья в Ундоровской зоне Волго-Свияжского междуречья одного из крупнейших в Восточной Европе горно-металлургического центра на местных месторождениях сидеритовой железной руды. С помощью металлографического метода нами изучаются технологии изготовления кузнечных и литых изделий. Металлографические исследования по методике Б.А. Колчина нескольких тысяч кузнечных изделий эпохи средневековья позволило реконструировать особенности местной железообработки. Сейчас встала задача массовых рентгенофлоурисцентных анализов для сравнения химического состава кузнечных изделий и железных руд из месторождений региона. Это позволит установить направления распространения готовой продукции из кузнечных центров Волго-Свияжского междуречья.

СИММЕТРИЯ КАК МЕТАЯЗЫК КУЛЬТУРЫ

Таланов В.М. [1], Таланов М.В. [2]

[1] Южно-Российский государственный политехнический университет

[2] Южный федеральный университет

e-mail: valtalanov@mail.ru

Обсуждается проблема структурного сходства различных знаковых систем. Сравниваются структурная организация произведений искусства и строение химических веществ в атомном и полиэдрическом представлениях, генетические и лингвистические коды. Отмечается поразительное структурное сходство (иногда изоморфизм) различных знаковых систем, относящихся к разным сферам культуры, что является объективной основой возможности существования универсального метаязыка культуры.

Многие структурные мотивы украшений мавзолеев и мечетей в исламском искусстве точно соответствуют мотивам структур неорганических кристаллов в полиэдрическом представлении. Интересный пример структурного изоморфизма – архитектурные шедевры с геодезическими поверхностями и структуры гиперфуллеренов. Отмечается структурная аналогия неорганических веществ со спиральными структурами в произведениях мирового искусства. Например, в соответствии со структурным мотивом двойной спирали молекулы ДНК построена скульптура Джамболоньи «Похищение сабинянок», созданная за 370 лет до открытия Д. Уотсона и Ф. Крика. Изучение средневекового исламского декоративного искусства показало, что некоторые геометрические орнаменты построены на принципах, которые близки к геометрическим моделям квазикристаллов.

По мнению авторов, симметрия – один из универсальных метаязыков культуры [1–3].

[1] Таланов В.М. Возможен ли универсальный метаязык культуры? Юж.-Рос гос. Политехн. Ун-т (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск: ЮРГПУ (НПИ), 2013, 88с.

[2] Таланов В.М. Семиотическая Вселенная и проблема структурного сходства знаковых систем. // Материалы международного научного симпозиума «Системно-синергетическая парадигма в культуре и искусстве», Таганрог: Изд-во ТРГТУ, 2004, с.71-75.

[3] Таланов В.М. Существует ли единый универсальный язык культуры? // Фундаментальные исследования, 2009, N 1, с. 92-94.

Секция 6. Образовательные аспекты современной кристаллографии

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ – ХИМИКАМ

Асланов Л.А.
МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет
e-mail: aslanov@struct.chem.msu.ru

В соответствии с требованиями самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта МГУ по направлению подготовки кадров высшей квалификации «04.06.01. Химические науки» обучение аспирантов теории и практике рентгеноструктурного анализа монокристаллов и порошковым методам определения кристаллических структур является элективным курсом. Проектирование учебного процесса рассматривалось нами как управление целевой программой по формированию базовых компетенций будущих выпускников и основное внимание было сосредоточено нами на оптимизации всего комплекса учебно-методических ресурсов. Так, разработка структуры курса и подбор учебного материала, выбор методики обучения с учетом современных педагогических технологий имело своей целью увеличение степени вовлеченности аспирантов в учебный процесс через повышение мотивации, что позволило сформировать у обучающихся компетенции, обозначенные в нормативных документах. Как известно, назревшей потребностью в области кристаллографической подготовки аспирантов и студентов-химиков является обучение дизайну кристаллов и нанокристаллов. Однако, если приемы конструирования металлорганических каркасов в общих чертах освоены выпускниками-химиками, то способам (методам, этапам, методологии) придания необходимой морфологии нанокристаллам необходимо обучать системно и начинать приходится, как правило, с чистого листа. Общие положения доклада будут проиллюстрированы конкретными примерами.

ПРЕПОДАВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОХИМИИ В РАМКАХ ОБЩЕГО КУРСА ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Болдырева Е.В.
НГУ
e-mail: eboldyreva@yahoo.com

Доклад обобщает тридцатилетний опыт преподавания кристаллографии и кристаллохимии в рамках общего курса химии твердого тела, который читается в Новосибирском государственном университете для всех химиков третьего курса. Для химиков важно с самого начала увидеть необходимость глубокого исследования структуры вещества для понимания свойств и поведения в химических реакциях. Важно также, чтобы подход к описанию структур протяженных структур веществ в твёрдом состоянии не входил в противоречие с тем, как описываются структуры отдельных молекул. Еще одна особенность преподавания - необходимость подать материал в очень концентрированном виде, в силу ограниченности времени, имеющегося в нашем распоряжении. Поэтому выработаны приемы, позволяющие быстро дать общие принципы, а затем оттачивать их в ходе практических занятий и неоднократных возвращений к одним и тем же понятиям по ходу курса, рассматривая их под разными углами.

[1] S. Grazulis, A. A. Sarjeant, P. Moeck, J. Stone-Sundberg, T. J. Snyder, W. Kaminsky, A. G. Oliver, C. L. Stern, L. N. Dawe, D. A. Rychkov, E. A. Losev, E. V. Boldyreva, J. M. Tanski, J. Bernstein, W. M. Rabeh and K. A. Kantardjieff // J. Appl. Cryst, 2015, 48, 48, 1964-1975.

[2] E. Boldyreva // J. Appl. Cryst., 2010, 43, 1172-1180.

МОДЕЛИРУЮЩИЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ РОСТА КРИСТАЛЛОВ

Гармашов С.И., Гершанов В.Ю.
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»
e-mail: garmashov@sfedu.ru

Компьютерное моделирование физических процессов, сопровождающих рост кристаллов, представляет интерес не только как современный инструмент научных исследований, но и способ наглядного представления преподаваемого материала при обучении студентов. В отличие от презентаций, моделирующие программы позволяют демонстрировать развитие процесса в динамике, варьировать исходные данные и непосредственно наблюдать результат влияния этого варьирования на изучаемый процесс. Компьютерные программы дают возможность преподавателю организовывать виртуальные лабораторные работы. Совмещение таких виртуальных работ с лабораторными стендами позволяет получить максимальный эффект для качественного обучения студента, т.к. в этом случае есть возможность научить студента правильно интерпретировать экспериментальные данные на основе компьютерных моделей. Учитывая то, что обучение студентов включает в себя занятия по программированию, для повышения уровня подготовки студентов важно привлекать их к самостоятельной разработке компьютерных программ, моделирующих изучаемые ими процессы.

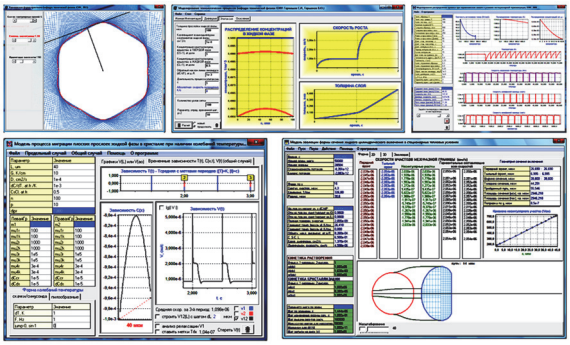


Рис.1. Интерфейсы некоторых моделирующих программ для обучения студентов.

В докладе представлены разработанные авторами и используемые при обучении студентов программы, моделирующие разнообразные процессы и явления, связанные с ростом кристаллов. На рис. 1 приведены интерфейсы некоторых из таких программ: программа, демонстрирующая методику построения равновесной формы кристалла в соответствии с принципом Кюри-Вульфа; комплекс программ, моделирующих эпитаксиальный рост из плоской прослойки раствора в расплаве, процесс формирования контролируемых полос роста, миграцию жидкой прослойки через кристалл под действием градиента температуры, эволюцию формы сечения цилиндрического включения в кристалле в стационарных и нестационарных тепловых условиях.

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА НА КАФЕДРЕ НЕЙТРОНОГРАФИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ ИМ. М.В. ЛОМОНОСОВА

Дадинова Л.А.[2,3], Аксенов В.Л.[1,2]
[1] *НИЦ «Курчатовский институт» ПИЯФ им. Б.П. Константинова*
[2] *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова*
[3] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: lubovmsu@mail.ru

Кафедра нейтронографии была образована в 2000 г. с целью подготовки специалистов по перспективным для современной кристаллографии исследованиям с использованием рассеяния нейтронов и синхротронного излучения. Основы и традиции научной школы кафедры были заложены лауреатом Нобелевской премии по физике академиком И.М. Франком.

Учебные планы кафедры ориентированы на практическую работу студентов и аспирантов на одном из лучших в мире источников нейтронов – реакторе ИБР-2, Курчатовском источнике синхротронного излучения и рентгеновских установках ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Научная работа студентов, аспирантов и сотрудников кафедры проводится методами дифракции, малоуглового рассеяния, рефлектометрии и неупругого рассеяния по всем направлениям современной кристаллографии, включая структурные исследования твердых тел и жидкостей, полимеров, растворов, химических реакций, биологических систем, новых функциональных материалов и инженерных изделий. В этих исследованиях используются уникальные свойства взаимодействия нейтронов с веществом: сильная изотопная зависимость (что особенно важно для биологических систем), наличие магнитного момента и спина (в ряде случаев единственный прямой способ изучения магнитных систем), слабое взаимодействие с атомными ядрами (что дает возможность изучать структуру в объеме), возможность проведения экспериментов в реальном времени, а также с использованием установок высокого давления, внешних электрических и магнитных полей.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ СОПРОВОЖДЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ КУРСОВ НА ГЕОЛОГИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ МГУ И ФИЛИАЛЕ МГУ В ДУШАНБЕ

Еремин Н.Н., Еремина Т.А.
МГУ имени М.В.Ломоносова, геологический ф-т
e-mail: neremin@geol.msu.ru

Курсы «кристаллография» и «кристаллохимия» являются базовыми при освоении естественнонаучного базиса для последующего изучения наук о веществе Земли, а также материаловедческих и структурно-химических дисциплин. Понимая исключительную важность в качественном преподавании этих дисциплин, авторы предприняли существенные усилия для их вывода на новый методический и технический уровень. Для этого были решены следующие задачи.

1) Написание новых современных учебников, адаптированных к современному состоянию вопроса в освещаемых предметах. В 2010 году был издан учебник «Кристаллохимия. Краткий курс» [1]. В 2013 году вышел в свет учебник «Занимательная кристаллография» [2], который активно востребован на начальных этапах освоения курса. Книга также предназначена для преподавателей школьных кружков.

2) Создание новых учебно-методических пособий и программ. С открытием филиала МГУ в Душанбе потребовалось создание учебно-методических комплексов по курсам «Кристаллография» и «Кристаллохимия», отражающих специфику филиала.

3) Создание персональных сайтов учебных курсов. Все курсы имеют действующее интернет-сопровождение на сервере http://cryst.geol.msu.ru/courses/.

4) Создание тренировочных и контрольных тестов, доступных в интернете. В обучении широко внедрены новые образовательные технологии, такие как интерактивное тестирование, включая тренировочную и контрольную часть с верификацией испытуемых и обратной связью с преподавателем. Интерактивные тесты доступны всем пользователям всемирной сети, включая лиц, использующим мобильные устройства.

[1] Урусов В.С., Еремин Н.Н. Кристаллохимия. Краткий курс (2010), Издательство МГУ, 256 стр.

[2] Еремин Н.Н., Еремина Т.А. Занимательная кристаллография (2013), Издательство МЦНМО, 150 стр.

ЗАНИМАТЕЛЬНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ ДЛЯ ШКОЛЬНИКОВ – МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

Еремин Н.Н., Еремина Т.А.
МГУ имени М.В.Ломоносова, геологический ф-т
e-mail: t_eremina@list.ru

Не секрет, что профессиональная ориентация каждого молодого человека формируется в еще детстве. В этом отношении кристаллография находятся в очень невыгодной позиции: несмотря на то, что 2014 был провозглашен ЮНЕСКО Международным годом кристаллографии, «кристаллография», как предмет не включена в школьную программу практически ни в одной стране мира. Лишь отдельные фрагменты этой замечательной науки о кристаллах можно встретить на уроках геометрии, физики и химии. Учебные пособия, адресованные преподавателям, работающим с детьми, практически отсутствуют. Конечно, в некоторых естественнонаучных центрах школьного дополнительного образования есть хорошие тематические классы, но, к сожалению, даже внутри них кристаллография преподается бессистемно, сами классы не оснащены современными материалами; а иногда кристаллографию в таких кружках просто некому преподавать.

Все это побудило авторов создать учебник [1], который может быть полезен для школьников, которые решили изучить основы кристаллографии в объеме, достаточным для успешного участия в школьных предметных олимпиадах, таких как «Московская открытая олимпиада по геологии» и олимпиада «Земля и Человек». Авторы постарались изложить новый и трудный для большинства детей материал максимально простым языком. Кроме того, данное издание может оказаться полезным для учителей кристаллографических классов при подготовке учебных планов. Каждый урок дополнен контрольными вопросами и практическими упражнениями для лучшего закрепления материала.

В приложениях приведен иллюстративный материал, представлены полезные ссылки на литературу и ресурсы интернета, а также приведены ответы к упражнениям каждой ступени обучения.

[1] Еремин Н.Н., Еремина Т.А. Занимательная кристаллография (2013), Издательство МЦНМО, 150 стр.

ПРЕПОДАВАНИЕ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ МГУ ИМ. М.В. ЛОМОНОСОВА

Илюшин А.С., Орешко А.П.
МГУ имени М.В.Ломоносова
e-mail oreshko@mail.ru

Преподавание рентгеновского структурного анализа на физическом факультете МГУ имеет давние традиции. В 1907 году в Московском университете начал свою работу выдающийся кристаллограф Юрий (Георгий) Викторович Вульф. Именно он повернул университетскую минералогическую кристаллографию к кристаллофизике и рентгеноструктурному анализу. В 1927 году была организована первая в мире кафедра рентгеноструктурного анализа. В 1954 году кафедра была преобразована в кафедру физики твердого тела.

В 1980-х годах широкое прикладное значение стало получать синхротронное излучение. Это очень сильно расширило область применения рентгеновских лучей и сказалось практически на всех методах исследования вещества. В свою очередь, появление новых методов исследования потребовало существенного изменения и расширения традиционных учебных курсов по теории рассеяния и взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, а также экспериментальным методам исследования. Практическое использование синхротронного излучения неразрывно связано с использованием мегаустановок, что не позволяет проведение практических занятий со студентами. Эта проблема была частично решена путем создания компьютерного практикума кафедры физики твердого тела, позволяющего проводить моделирование ряда экспериментов на синхротронном излучении.

В настоящее время на физическом факультете курсы по применению рентгеновского излучения для исследования атомно-кристаллической структуры вещества читаются для студентов и аспирантов различных кафедр. Эти курсы охватывают как вопросы классического рентгеноструктурного анализа, так и новейшие и актуальнейшие вопросы резонансной дифракции и рефлектометрии, позволяющие изучать электронные состояния и магнитную структуру вещества.

МОДЕЛЬ ОПИСАНИЯ ЭВОЛЮЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА

Кодесс Б.Н., Нечаева Е.Н.
ФГУП «ВНИИМС», Росстандарт
e-mail: kodess@mail.ru

Кристаллическое состояние и структурные особенности на различных масштабах и уровнях сложности существующих и возникающих пространственно-временных подсистем описывается с применением комплексных многофакторных характеристик с различными размерностями. На атомном масштабе строения эти характеристики отражают связь анализируемой композиции (состава) с эволюцией, то есть с временными эффектами, например, диффузионными процессами и с протеканием фазовых переходов. На микроструктурном масштабе они акцентированы на связях, учитывающих размеры и морфологию, которые отражают уровень и способ локализации вещества в пространстве. При описании энергетических характеристик вещества используются фундаментальные характеристики – распределение зарядовой плотности в объеме элементарной ячейки, ее размеры, а также симметрию этой элементарной ячейки; эти характеристики, в настоящее время рассчитываются из «первых принципов» и могут непосредственно сопоставляться с экспериментальными данными.

Для описания возникающих связей на различных уровнях строения представлена наглядная многомерная модель фазового пространства (описания состояния кристаллического вещества), которая создана по аналогии с подобной многомерной моделью для описания основных единиц системы СИ, также применяемых для описания пространственных, временных и энергетических характеристик веществ и взаимодействия их с окружающей средой. Опыт использования в учебной практике показал, что предложенная модель является хорошей основой для более доступного объяснения многофакторных характеристик конденсированных веществ в кристаллическом состоянии. Она должна обеспечивать более оптимальный перенос накапливаемых знаний об особенностях кристаллического состояния в разработку новых материалов и технологии их получения и обработки и при использовании в различных сферах.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ КАК ИНСТРУМЕНТ В ПРЕПОДАВАНИИ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

Козловская К.А.
МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет
e-mail: kozlovskaya@physics.msu.ru

В последние десятилетия многие исследователи, занятые в самых разных областях науки, используют в своей работе компьютерную визуализацию – мощный инструмент, помогающий нам представить то, что нельзя увидеть. Я расскажу о применении визуализации в преподавании физики кристаллов.

Большинству людей воспринимать и анализировать изображение проще, чем текст или формулы. Это подтверждается исследованиями человеческого мозга: по разным данным через зрение люди получают от 60 до 90% информации, а миллионы нейронов заняты обработкой поступивших визуальных образов [1]. Смысл научной визуализации в том, чтобы задействовать эту “видеокарту” мозга для эффективного обучения и решения научных проблем.

Современные образовательные программы ведущих вузов мира опираются на визуализацию и интерактивность, т.е. на одновременное изучение законов физики и их компьютерное моделирование. Ведь на сегодняшний день существует большой выбор компьютерных программ, созданных для работы в области физики кристаллов.

С учетом международного опыта и на основе современных технологий на физическом факультете МГУ был разработан и прочитан курс “Научная визуализация в физике конденсированного состояния”. В своем докладе я планирую показать, как с помощью компьютерной визуализации и моделирования объясняются неинтуитивные понятия и законы кристаллофизики.

[1] David H. Hubel and Torsten N. Wiesel. “Brain and visual perception: the story of a 25-year collaboration”. — Oxford University Press US, 2005.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ ДЛЯ ФИЗИКОВ: ОТ КЛАССИЧЕСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ К НОВЫМ ГЕОМЕТРИЯМ

Овчинникова Е.Н.
МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет
e-mail: ovtchin@gmail.com

Симметрия является свойством, характерным как для живой, так и неживой материи, и активно присутствует во всех областях человеческой деятельности, в том числе живописи, литературе, архитектуре и различных областях науки: математике, физике, химии, биологии и геологии [1]. Кристаллография, которая является частью науки о симметрии, помимо чисто практического применения, имеет глубокий научно-познавательный аспект.

Курс кристаллографии, который читается на отделении физики твердого тела физического факультета МГУ, имеет своей основной целью дать слушателям знания, необходимые для использования в рентгеноструктурном анализе. Однако, развитие экспериментальных методов, в том числе использующих мощные источники нейтронов и синхротронного излучения, и появление новых объектов исследования, в том числе наноструктур, квазикристаллов и мультиферроиков – открывают новые уровни знания о строении вещества. В ряде случаев для описания структуры на новом уровне и взаимодействия с ней разных видов излучения требуется привлекать новые представления о симметрии. Физический факультет имеет богатые традиции в области развития теории симметрии. В работах академика А.В. Шубникова впервые было развито представление об антисимметрии, которое легло в основу описания магнитных структур. Открытие несоразмерно модулированных фаз и квазикристаллов привело к понятию о суперсимметрии и использованию многомерного подхода, который был заложен в работах А. Маккея. Современная кристаллография не ограничивается федоровскими группами, и является динамично развивающейся наукой, далеко шагнувшей за пределы, необходимые для практического использования [2]. Нужны ли такие знания студентам-физикам? Имея в виду получение на выходе широко образованного ученого, способного работать на стыке разных областей науки, возможно, необходимо введение понятий о современном состоянии теории симметрии с элементами теории представлений групп на уровне магистерских и аспирантских программ, ограничившись для базового уровня классическими представлениями.

[1] Шубников А.В, Копцик В.А.. Симметрия в науке и искусстве (1972). Изд-во Наука, 337 с.

[2] Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов (2010). М.: ФИЗМАТЛИТ, 264 с.

ИНТЕРАКТИВНЫЙ ВИРТУАЛЬНЫЙ ПРАКТИКУМ – НОВЫЙ ТИП ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО РЕСУРСА

Солдатов А.В., Власенко Д.Е., Гуда А.А, Солдатов М.А.
Южный федеральный университет
e-mail: soldatov@sfedu.ru

Разработан интерактивный виртуальный практикум в области наук о материалах (методики исследования атомной и электронной структуры материалов) в виде обучающей 3D игры. В виртуальной лаборатории обучаемые изучают сложные физические методики, реализованные на современном высокотехнологичном оборудовании, в виде интерактивной игры типа квеста. Виртуальный практикум позволяет экономить средства и снижать риски при подготовке к работе с высокотехнологичным экспериментальным оборудованием. По данной методике можно проводить обучение студентов, переподготовку специалистов на новых высокотехнологичных установках, а также и использовать эти модули в программах инклюзивного обучения людей с ограниченными возможностями.

Основанием для выполнения работы явилась выявленная проблема эффективного обучения студентов и новых сотрудников в современных высокотехнологичных лабораториях. Актуальность проблемы обусловлена современными темпами развития новых технологий и темпами переоснащения лабораторий. На данный момент оборудование, расходные материалы и сами образцы становятся все более дорогими и сложными в обращении, по этой причине необходима интенсивная эффективная подготовка специалистов и студентов.

Новизна подхода заключается во внедрении трехмерных игровых технологий в процесс обучения. Интерактивный подход стимулирует интерес обучаемых, позволяет расставить научные акценты на те, или иные аспекты конструкций прибора или особенности метода, а также обеспечивает возможность фокусировки внимания на конкретной задаче и методах ее решения. Создание виртуальной лаборатории осуществляется путем моделирования виртуального трехмерного аналога реальной лаборатории, включая внутренние устройство приборов. Далее создаётся сценарий, соответствующий целям программы обучения. Связь виртуальных моделей и обучающего сценария осуществляется в рамках объектно-ориентированного подхода в среде разработки трехмерных приложений Unity3d.

ОПЫТ ПРЕПОДАВАНИЯ ОСНОВ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СИММЕТРИИ И КРИСТАЛЛОГРАФИИ В СТАРШИХ КЛАССАХ ПРОФИЛЬНОЙ ШКОЛЫ

Фролов К.В.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ Кристаллография и фотоника» РАН
ГБОУ г. Москвы средняя общеобразовательная школа с углубленным изучением физики и математики №2007
e-mail: green@crys.ras.ru, frolov.edu@gmail.com

Представлен опыт преподавания основ пространственной симметрии и кристаллографии в 9-11 классах школ естественнонаучного профиля в рамках основного углублённого курса физики и в рамках программ дополнительного образования. Показано, что изучение основ кристаллографии позволяет повысить интерес учащихся к физике и их обучаемость по предмету, создаёт возможности для формирования разнообразных межпредметных связей между курсами физики, математики, информатики, химии, биологи, истории и мировой художественной культуры, является удобной и эффективной платформой для развития проектной деятельности учащихся. Представлены примеры использования в учебном процессе учебно-методической литературы [1,2], пространственного конструктора Zometool [3], образовательных программных продуктов [4-6].

Работы выполнены при частичной финансовой поддержке Образовательного Фонда «Талант и успех».

[1] Еремин Н.Н., Еремина Т.А. Занимательная кристаллография. МЦНМО, 2013.

[2] Broug E. Islamic Geometric Patterns. Thames and Hudson, 2008.

[3] Zometool Inc. // [Корпоративный сайт] / URL:http://www.zometool.com (дата обращения 10.07.16.)

[4] vZome desktop application // URL:http://vzome.com (дата обращения 10.07.16.)

[5] GeoGebra. Графический калькулятор // URL:http://www.geogebra.org (дата обращения 10.07.16.)

[6] Quiztallography. Educational game about the Crystallography and Point Symmetry Groups // URL:http://departaments.uab.cat/geologia/PSG (дата обращения 10.07.16.)

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ: ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

Шерстюк Н.Э., Мишина Е.Д., Сигов А.С.
Московский технологический университет (МИРЭА)
e-mail: nesherstuk@mail.ru

Информативность нелинейно-оптических методик связана с симметрийными особенностями системы. Нелинейно-оптическая поляризация описывается тензором на единицу большего ранга, чем линейная поляризация. Это означает, что свойства, неразличимые для линейной оптики, оказываются диагностируемыми в нелинейной оптике.

Чувствительность эффекта генерации ВГ к нелинейно-оптическим свойствам тонких пленок и низкоразмерных структур обусловлена существованием симметрийного правила запрета на генерацию ВГ в объеме центросимметричных сред в дипольном приближении. Поэтому основные источники ГВГ локализованы в областях нарушения инверсной симметрии, к которым, в том числе, относятся поверхности (приповерхностные слои) центросимметричных сред, флуктуации физических величин на поверхности и в объеме среды, пространственное распределение неоднородностей (дефектов). Как следствие, характеристики излучения ВГ, такие как интенсивность, поляризация, диаграмма рассеяния, проявляют высокую чувствительность к структуре подобных систем.

В данном докладе представлены возможности методики генерации второй оптической гармоники для исследования параметров структуры твердых тел, и обсуждаются прикладные задачи в этой области, которые могут быть решены в рамках учебного процесса с использованием созданного в МИРЭА виртуального лабораторного практикума.

Практикум создан на базе фемтосекундной и нелинейно-оптической диагностики и включает в себя следующие технологии изготовления и анализа наноматериалов: ллазерный отжиг и кристаллизация, симметрийный нелинейно-оптический анализ для определения ориентации поверхности срезов материалов микро- и наноэлектроники; методы фемтосекундной оптики (в том числе – методики оптической накачки-зондирования), а также электро- и магнитооптические методики исследования наноматериалов. В качестве объектов исследования используются тонкие пленки и наноструктуры на основе ферроиков, полупроводниковые монокристаллы, плазмонные и фотонные кристаллы, метаматериалы.

Микросимпозиум 1. Фотоактивные материалы и фотовольтаические структуры

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕТОД САМОСБОРКИ 2D НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Асланов Л.А., Захаров В.Н., Пасешниченко К.А., Яценко А.В.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

zakharov@struct.chem.msu.ru

Кристаллизация полупроводников в коллоидных средах представляется наиболее продуктивной для применения в промышленных масштабах. 2D-нанокристаллы (2D-нк) имеют толщину меньше диаметра экситона Бора и два поперечных измерения микронной величины**.** Они обладают следующими преимуществами: число «прыжков» носителей заряда, необходимое для достижения электродов, сокращается на порядки при переходе от квантовых точек (КТ) к 2D-нк; по сравнению с КТ, 2D-нк лучше совместимы с обычными технологическими процессами (легко допируются, и на их поверхности печатаются нужные электронные схемы); 2D-нк можно связать между собой с помощью электроннолучевой литографии.

Нами разработан коллоидный метод получения свободных кремниевых 2D-нк [1]. Рост пластин происходит за счет специфического межлигандного взаимодействия (СМВ) соседних перфторфенильных (ПФ) колец, которое приводит к образованию слоев ПФ лигандов благодаря их самосборке во фторофобных средах. Лиганды тянут за собой КТ, и кремниевые частицы агрегируются в кристаллические пластины, покрытые ПФ лигандами с обеих сторон.

Используя принцип СМВ, мы получили 2D-нк PbS и CdS (1000 x 1000 и 400 x 500 нм^2, соответственно) взаимодействием водных растворов $Pb(NO_3)_2$ и $CdCl_2$ со смесью водных растворов Na_2S и пентафтортиофенолята натрия. Оценка размеров частиц и их кристалличности выполнена с использованием ПЭМ.

Получение 2D-нк трёх соединений свидетельствует о том, что принцип СМВ может быть использован как универсальный подход для дизайна фотовольтаических наноструктур.

Работа поддержана РФФИ (гранты № 11-03-01071 и 15-03-06948) и Программой развития МГУ имени М.В.Ломоносова.

[1] Aslanov L. et al. Solid State Phenomena // 2015, V. 233-234, pp. 575 – 578.

ФОТОХРОМНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ И ИХ СВОЙСТВА

Барачевский В.А.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Центр фотохимии РАН

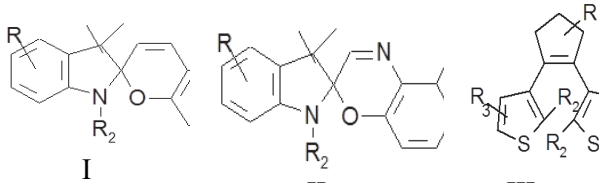
ФГБУН Межведомственный центр аналитических исследований РАН

e-mail: barva@photonics.ru

Явление фотохромизма, заключающееся в обратимом изменении спектральных свойств, прежде всего окраски, получило широкую известность в связи с широкими возможностями его применения в фотонике и оптоэлектронике. Это обусловлено тем, что, наряду с изменением спектральных характеристик, фотохромные вещества и системы на их основе изменяют другие оптические (показатель преломления, поляризуемость, нелинейно-оптические), электрические, магнитные, механические свойства и реакционную способность. Это позволило реализовать фотоуправляемые модуляторы света, оптическую память, оптические хемосенсры и др.

В настоящее время особое внимание исследователей направлено на создание фотохромных наночастиц в виде либо наночастиц фотохромных веществ, либо гибридных соединений по типу «ядро-оболочка». В последнем случае используются наночастицы благородных металлов, углеродных соединений, силикатов, квантовые точки в качестве ядер, на поверхности которых находятся химически или физически адсорбированные фотохромные органические соединения.

Настоящий доклад представляет анализ результатов собственных исследований, выполненных в области нанофотохромизма с использованием фотохромных органических соединений из классов спиропиранов (I), спирооксазинов II) и диарилэтенов (III).



I II III

В результате выполненного сравнительного спектрально-кинетического исследования показана возможность создания фотохромных наночастиц типа ядро-оболочка на основе химического взаимодействия функционализированных молекул органических фотохромных соединений из классов термически обратимых спиросоединений и термически необратимых диарилэтенов с неорганическими наночастицами благородных металлов, фуллеренов и наноалмазов. Эффективность взаимодействия определяется структурой соединений. С использованием диарилэтенов, органических (оксазин, феналенон в присутствии Ag наночастиц) и неорганических (квантовых точек CdSe/ZnS) флуорофоров впервые созданы твердофазные наноструктурированные оптические элементы, одновременно обратимо изменяющие абсорбционные, люминесцентные и электрические свойства в процессе фотоиндуцированных превращений фотохромных фрагментов.

Фотохромые наночастицы диарилэтенов и спиропиранов, полученные методом коагуляции, испытывают фотохромные превращения как в растворах, так и в слоях поливинилового спирта, проявляя более высокую цикличность фотохромных превращений по сравнению с молекулярно диспергированными системами. Агрегаты фотохромных спирокумариноспиранов в полимолекулярных слоях обеспечивают нелинейно-оптическое преобразование лазерного излучения во вторую гармонику.

В заключении рассмотрены перспективы развития данного направления и возможности практического использования фотохромных наночастиц в фотонике и оптоэлектронике.

[1] Barachevsky V. A., Karpov R. E., Nagovitsin I. A. , et al. // Superlattices and Microstructures, 2004,v.36, p 73-75.

[2] Барачевский В.А. // Химия высоких энергий, том 41, с 226-238.

[3] Барачевский В.А. // Нанотехника,2007, №2, с18-32.

[4] Адамов Г.Е., Барачевский В.А., Гребенников Е.П. и др. // Российские нанотехнологии, 2008, том 3, с 10-12.

[5] Кобелева О.И., Валова Т.М., Барачевский В.А.и др.// Опт. и спектр., 2010, том 100, № 1, с 106-110.

[6] Барачевский В.А., Кобелева О.И., Валова Т.М. и др. //Теорет. и эксперим. химия, 2012, том 48, № 1, с.12-17.

[7] Василюк Г.Т., Маскевич С.А., Аскирка В.Ф. и др. // Сборник научных трудов IX Международной научной конференции «Лазерная физика и оптические технологии», Гродно, ГГУ, 2012, с 195-198.

[8] Кобелева О.И., Барачевский В.А., Тамеев А.Р. и др. // Материалы докладов 8 Всероссийской научной конференции «Технологии и материалы для экстремальных условий» (фотоника и нанофотоника), М., МЦАИ РАН, 2013, с196-201.

[9] Barachevsky V.A. //Org. Photonics. Photovolt., 2015, v.3, p 8-41.

[10] Barachevsky V.A., Venidiktova O.V., Kobeleva O.I., et al. // IEEE Conference Publications. Nanotechnology (IEEE-NANO), 2015 IEEE 15th International Conference, 2015, p 358-361

[11] Tuktarov A.R., Khuzin A.A., Akhmetov A.R., Barachevsky V.A., et al.// Tetrahedron Lett., 2015, v. 56, № 52, p 7154-7157.

КОЛЛОИДЫ ФТОРИДНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ, ЛЕГИРОВАННЫЕ ИОНАМИ НЕОДИМА, ДЛЯ БИОВИЗУАЛИЗАЦИИ В БЛИЖНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ

Ванецев А.С.[1], Рябова А.В.[1,2], Орловский Ю.В.[1]

[1] Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

[2] Национальный исследовательский ядерный институт «МИФИ»

e-mail: orlovski@Lst.gpi.ru

Разработана методика микроволнового гидротермального синтеза (MWHT) кристаллических наночастиц (НЧ) фторидов, легированных ионами Nd^{3+}. Синтезированы концентрационные серии различных легированных нанокристаллических соединений. Измерена и проанализирована их кинетика флуоресценции [1]. Разработан новый метод для характеризации Nd^{3+} легированных кристаллических НЧ в качестве люминесцентного агента для биовизуализации в ближнем ИК спектральном диапазоне, основанный на анализе кинетики примесного тушения. Показано, что тушащие ОН акцепторы энергии распределены в объеме НЧ, а не на их поверхности. НЧ Nd^{3+}: LaF_3 продемонстрировали максимальную интенсивность флуоресценции по сравнению с легированными Nd^{3+} вододиспергируемыми НЧ KY_3F_{10}, KYF_4 и YPO_4.

Мы сравнили НЧ Nd^{3+}:LaF_3, синтезированные методом MWHT, с синтезированными широко используемым методом соосаждения (МС) в водных растворах при слегка повышенных температурах. Показано, что метод MWHT позволяет получать НЧ лучшей кристалличности и дисперсности, чем МС. Установлена прямая корреляция между степенью кристалличности и содержанием ОН групп в объеме НЧ. Высоко кристаллические легированные ионами Nd^{3+} НЧ LaF_3, полученные с помощью метода MWHT, содержат в объеме меньшее количество ОН групп и, в результате, демонстрируют в 2-3 раза выше, квантовый выход люминесценции по сравнению с хуже закристаллизованными НЧ с той же концентрацией легирующей примеси, синтезированные с помощью МС (Рис. 1).

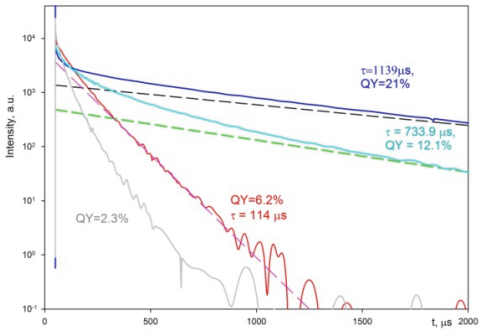


Рис.1. Кинетика люминесценции в зависимости от метода синтеза и концентрации примеси: синий - LaF_3:Nd^{3+}(0.1%), MWHT; голубой - LaF_3:Nd^{3+}(0.1%), МС; красный - LaF_3:Nd^{3+}(6%), MWHT; серый - LaF_3:Nd^{3+}(6%), МС; пунктирные линии – подгонка экспоненциальным затуханием дальней стадии кинетики.

Работа поддержана РНФ, проект № 16-12-10077.

[1] Orlovskii Yu.V., Vanetsev A.S. и др. // J. Alloys Comp., 2016, том 661, с. 312-321.

НАНОКОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ АМОРФНОГО КРЕМНИЯ ДЛЯ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Кашкаров П.К., Форш П.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
МГУ имени М.В. Ломоносова
e-mail: forsh@physics.msu.ru

Нанокристаллический кремний (nc-Si:H), представляющий собой двухфазный материал – матрицу аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) с включениями кристаллического кремния нанометрового размера, является одним из наиболее перспективных материалов для использования в тонкопленочной солнечной энергетике и электронике. Интерес к этому материалу во многом продиктован тем, что в отличие от a-Si:H, получившего широкое распространение в тонкопленочной оптоэлектронике, он менее подвержен изменению своих свойств при освещении и обладает большей (по сравнению с a-Si:H) подвижностью носителей заряда. В связи с этим, использование nc-Si:H вместо a-Si:H в тонкопленочных приборах может значительно улучшить их характеристики, в частности увеличить КПД солнечных элементов. Для эффективного использования в оптоэлектронных приборах пленок nc-Si:H необходимо детально исследовать их структуру, а также оптические, электрические и фотоэлектрические свойства.

На основе обобщения полученных экспериментальных результатов построены модели генерации, переноса и рекомбинации носителей заряда, объясняющие особенности оптических, электрических и фотоэлектрических свойств nc-Si:H. Выявлена корреляция структуры и электронных свойств нанокристаллического кремния. Определены структурные параметры (объемная доля кристаллической фазы, размер нанокристаллов и пр.) и технологические режимы получения пленок nc-Si:H, обеспечивающие создание эффективных и деградационно-стойких тонкопленочных солнечных элементов на их основе.

ФОТОАКТИВНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ НАНОКРИСТАЛЛЫ ДЛЯ ЭКОЛОГИИ И БИОМЕДИЦИНЫ

Константинова Е.А., Кашкаров П.К.
Физический Факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»
Московский физико-технический институт (университет),

В последние годы активно исследуются физико-химические свойства полупроводниковых нанокристаллов ввиду перспективы их использования для микроэлектроники, экологии и биомедицинских применений. Поэтому целью своей работы мы выбрали фотоактивные наночастицы кремния и диоксида титана, как наиболее подходящие для указанных целей.

Образцы кремниевых нанокристаллов были синтезированы электрохимическим способом, а наночастицы диоксида титана – золь-гель методом. Детали синтеза подробно изложены в работах [1] и [2], соответственно. Исследование фотоэлектронных свойств полученных материалов выполнялось с помощью спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Был изучен процесс генерации синглетного кислорода и определения его концентрации при фотовозбуждении кремниевых нанокристаллов, основанный на изменении времен релаксации спинов – оборванных связей кремния. С использованием метода импульсного ЭПР зафиксировано увеличение времен продольной T_1 и поперечной T_2 релаксации спиновых центров при освещении нанокристаллического кремния в кислороде, что объясняется генерацией синглетного кислорода. В ходе исследования были реализованы экспериментальные схемы, позволившие непосредственно в резонаторе спектрометра ЭПР инициировать фотокаталитический процесс разложения токсичных веществ на примере формальдегида и толуола на поверхности наночастиц диоксида титана. Также в условиях “in situ” было реализовано облучение образцов с различной энергией квантов, что позволило в результате примесного поглощения инициировать процессы перезарядки в системе радикалов, и определить положение их энергетических уровней в запрещенной зоне.

Полученные результаты могут быть непосредственно использованы при разработке электронных устройств на основе нанокристаллов кремния и диоксида титана.

[1] C.S. Sharov, E.A. Konstantinova, L.A. Osminkina, V.Yu. Timoshenko, P.K. Kashkarov. Chemical Modification of a Porous Silicon Surface Induced by Nitrogen Dioxide Adsorption // J. Phys. Chem. **B**. – 2005. – V. 109. – P. 4684-4693.

[2] N.T. Le, E.A. Konstantinova, A.I. Kokorin, T. Kodom, N. Alonso-Vante. Recharge processes of paramagnetic centers during illumination innitrogen-doped nanocrystalline titanium dioxide. Chemical Physics Letters, v. 635, p. 241–244 (2015).

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ТОПОХИМИЧЕСКОГО [2+2]-ФОТОЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

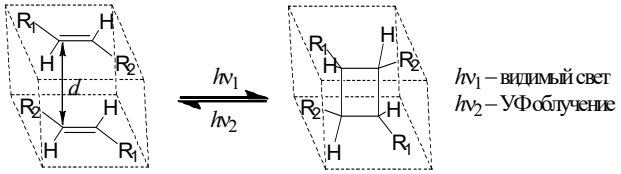
Кузьмина Л.Г.[1], Ведерников А.И.[2], Алфимов М.В.[2], Громов С.П.[2]

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

[2] *Центр фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия*

e-mail: kuzmina@igic.ras.ru

Методом РСА изучена реакция [2+2]-фотоциклоприсоединения (ФЦП), осуществляющаяся в растворах и кристаллах. ФЦП требует «предорганизации» этиленовых единиц с d < 4.2 Å:



Для плоских сопряженных систем возможны канонические упаковки:

Кристаллические упаковки 1-4 включают «предорганизованный димер» в качестве элемента.

Изучены структуры стириловых красителей (**СК**) Het^{+}-CH=CH-Ar X и стирилгетероциклов (**СГ**) Het-CH=CH-Ar^{-} (Het = *N*-гетероцикл) до и после облучения. **СК** кристаллизуются в упаковках 1 и 2, благоприятных для ФЦП, а **СГ** - в 3-6, из которых 5 и 6 не совместимы с ФЦП. Повышение вероятности формирования в **СГ** упаковок 3 и 4, благоприятных для ФЦП, возможно двумя способами химической модификации молекул. (1) Расширением области сопряжения путем замены одного гетероцикла другим. При этом увеличивается вероятность формирования «предорганизованных димеров» за счет стэкинг-взаимодействий. (2) Протонированием молекул **СГ**, превращающем их в электронные аналоги **СК**.

Рассмотрены разные симметрические операции в предорганизованном димере (ось 2, плоскость m, центр симметрии), приводящие в результате ФЦП к разным изомерам циклобутана и способы их достижения.

Доказана осуществимость прямой и обратной реакций ФЦП в монокристалле.

Изучение ФЦП в кристалле имеет преимущества: (1) возможность применения метода РСА; (2) не требует сложного многостадийного синтеза для априорной предорганизации производных этилена, необходимой для протекания реакции ФЦП в растворе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 14-03-00012), Российской академии наук, Королевского научного общества и Королевского химического общества Великобритании.

ДЕГРАДАЦИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЕ ВНЕШНЕЙ КВАНТОВОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Лазарев В.В., Блинов Л.М., Юдин С.Г., Палто С.П.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ИК РАН

e-mail: lbf@ns.crys.ras.ru

Преимуществом органических фотовольтаических материалов по сравнению с неорганическими – это интенсивное поглощение света, а также дешевизна материалов [1]. Здесь исследуется фоточувствительность *S=I/P*, (*I* –фототок, *P*- мощность падающего света) смесевой композиции донора (CuPc) и акцептора (C_{60}), а также ее деградация во времени и восстановление, практически не обсуждаемых ранее. Образец представляет собой наноразмерную структуру кварц-SnO_2-CuPc/C_{60}(50 нм)-Al. В ней нет каких-либо дополнительных слоев (например, PEDOT) или покрытий электродов, так как в упрощенных структурах легче разобраться с проблемой их деградации.

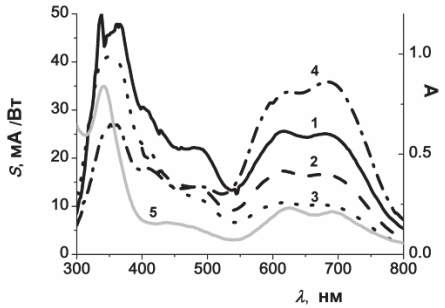


Рис.1. Спектральные кривые фоточувствительности в зависимости от времени: исходный спектр (кривая 1), измерение после 20 дней (кривая 2), после 124 дней (кривая 3). Кривая (4) получена путем восстановления S электрическим полем. Кривая 5 - оптическая плотность слоя смеси CuPc/C_{60}.

Рисунок показывает, что исходная *S* уменьшилась в 2.5 раза за 124 дня (кривые 1-3). Интересно, что деградация смеси в области 550-800 нм (CuPc) значительно сильнее, чем в области 300-450 нм (C_{60}). Для восстановления величины *S* использовались переключения внешнего постоянного напряжения от -6 до +5 В и обратно. В результате максимум *S*=36 мА/Вт при λ=680 нм (кривая *4*) превысил максимум исходного спектра (кривая *1*). Соответственно, внешняя квантовая эффективность (*EQE*) достигла величин 6.6% (680 нм) и 14% (450 нм). Однако, в дальнейшем опять наблюдается медленная деградация *EQE*. Отсюда можно сделать вывод, что в тонкопленочной структуре фототок снижается из-за накопления пространственного заряда вблизи электродов и понижения внутреннего поля, необходимого для транспорта носителей заряда к электродам.

[1] K.-J. Baeg et al.// Adv. Mater. 2013. V.25. P. 4267.

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ ТИПА “КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ЯДРО-ОБОЛОЧКА”

Багараташвили В.Н.[1], Свиридов А.П.[1], Тимашев П.С.[1], Рыбалтовский А.О.[2], Ищенко А.А.[3]

[1]Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2]НИИ ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова

[3]Московский государственный университет тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

e-mail: sviridoa@gmail.com

Квантоворазмерные гибридные наночастицы кремния с кристаллическим ядром (до 10 нм) и субоксидной оболочкой SiO_x (x<2) толщиной 1-2 нм, обладают яркой фотолюминесценцией (ФЛ) в красно-инфракрасной области спектра (600-1100 нм) [1]. Они востребованы в фотонике, фотовольтаике, биомедицине, сенсорике. Разработана технология химического синтеза наночастиц кремния Si/SiO_x (x<2) типа “ядро-оболочка” из монооксида кремния (SiO) путем реакции диспропорционирования $2SiO \rightarrow Si+SiO_2$ [2]. С помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, рентгеновской дифрактометрии, КР спектроскопии показано, что изменение температуры процесса синтеза в пределах 350-1100°C позволяет управлять размерами и кристаллической структурой гибридных наночастиц кремния [3] и их фотолюминесцентными свойствами. Предложен механизм фотолюминесценции наночастиц кремния, основанный на поглощении света ядром, возбуждении экситонов и передаче энергии экситонов люминесцентным дефектным центрам кремния в оксидной оболочке. Обнаружены и изучены эффекты обратимого тушения ФЛ под действием возбуждающего излучения, которые объясняются прямыми и обратными туннельными переходами электронов между различными дефектными центрами системы.

[1] Ledoux G., Gong J. et al, // Appl Phys Lett, 2002, V. 80, N 25, p.4834.

[2] Dorofeev S.G., Ischenko A.A. et al, // Current Appl Phys, 2012, V.12, N 3, p. 718.

[3] Rybaltovskiy A., Ischenko A. et al // Mater Sci, 2015, V 50, N 5, p. 1.

ФОТОПРОЦЕССЫ В ПЛЕНКАХ ОКСИДА ГРАФЕНА

Смирнов В.А.[1,2,3], Плотников В.Г.[2,3], Алфимов М.В.[2,3]

[1]ФГБУН Институт проблем химической физики РАН

[2]Центр фотохимии ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3]Томский государственный университет

e-mail: vas@icp.ac..ru

Оксид графена (ОГ) содержит на своей плоскости кислородсодержащие группы, такие как гидрокси, эпокси, карбонильные и карбоксильные. Термическим и химическим восстановлением можно практически полностью «очистить» ОГ от кислородсодержащих групп и восстановить его до графена. С другой стороны, сам ОГ может служить важным материалом в различных приложениях, например, в суперконденсаторах. Одним из процессов восстановления ОГ, кроме термического и химического, является его восстановление при облучении УФ светом, которое начинается при энергии фотона выше 3.2 эВ, В работе рассмотрены механизмы первичных процессов диссоциации одинарных связей (группа OH) и молекулярный отрыв:

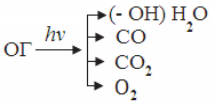
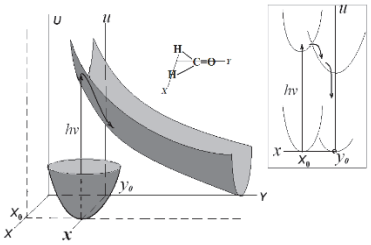
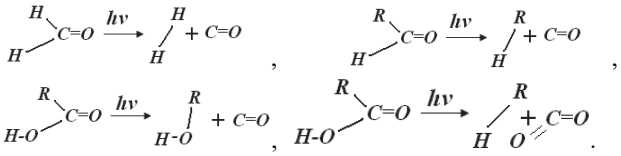


Схема процесса фотоотщепления молекулы H_2 от молекулы формальдегида представлена на рисунке, на вставке представлено сечение по плоскости *xyu*.



Аналогично отрыву H_2 происходит молекулярный отрыв CO и CO_2:



Мы предполагаем, что молекула O_2 образуется в концертном механизме согласно схеме на фрагменте ОГ:

[1] В.Г. Плотников, В.А. Смирнов, М.В. Алфимов, Ю.М. Шульга. О механизме фотовосстановления оксида графита, Химия высоких энергий, 2011, т. 45, № 5, с. 445–449.

[2] В.А. Смирнов, Н.Н. Денисов, М.В. Алфимов, Фотохимическое восстановление оксида графита, Российские нанотехнологии, 2013, т. 8, №1-2, с. 1-19.

[3] В.А. Смирнов, Н.Н. Денисов, В.Г. Плотников, М.В. Алфимов, Фотохимимческие процессы в пленках оксида графена. Химия высоких энергий, 2016, т. 50, № 1, с. 54–63.

ИНТЕГРАЛЬНАЯ ОПТИКА НА ОСНОВЕ НОВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ. ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Соколов В.И.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: visokol@rambler.ru

Рассмотрены достижения и перспективы развития интегральной оптики на основе новых фторсодержащих полимерных материалов. Такие материалы обладают высокой оптической прозрачностью во всех трех «телекоммуникационных» диапазонах длин волн вблизи 0.85, 1.3 и 1.55 мкм и высокой активностью в процессе радикальной фотополимеризации. Это позволяет использовать для формирования полимерных фотонных устройств методы контактной УФ фотолитографии и прямого лазерного рисования.

Обсуждаются подходы к формированию субмикронных брэгговских решеток в полимерных волноводах под действием актинического излучения с длиной волны 325 нм (He-Cd лазер) с целью создания узкополосных частотно-селективных фильтров.

Проанализированы возможности создания активных интегрально – оптических устройств для телекоммуникационного С – диапазоне длин волн 1525 – 1565 нм на основе нанокомпозитных полимерных материалов с внедренными нанокристаллами $NaYF_4$, $NaLuF_4$, легированными редкоземельными элементами (Er, Yb, Ce и др.), или электрооптическими хромофорами. Такие устройства включают компактные волноводные усилители, высокоскоростные модуляторы и переключатели на основе волноводных интерферометров Маха-Цендера, волноводные лазеры с распределенной обратной связью.

Разработки в области полимерной интегральной оптики могут найти применение для решения широкого круга практических задач, в частности, создания высокоскоростных оптических шин передачи данных для перспективных супер – ЭВМ экзафлопсной производительности, полностью оптических мультиплексоров – демультиплексоров для оптоволоконных линий связи, различных устройств радиофотоники (волноводных линий задержки, электрооптических модуляторов и др.), высокоскоростных оптических межсоединений для авиационной промышленности.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ МУЛЬТИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОКОМПЛЕКСЫ, АКТИВИРУЕМЫЕ ГЛУБОКО ПРОНИКАЮЩИМ В БИОТКАНИ ИНФРАКРАСНЫМ СВЕТОМ

Хайдуков Е.В.[1], Рочева В.В.[1], Миронова К.Е.[1], Хоченков Д.А.[1,2], Генералова А.Н.[1], Нечаев А.В.[1], Чичков Б.Н.[1], Степанова Е.В.[2], Звягин А.В.[1], Семчишен В.А.[1], Панченко В.Я.[1]
[1]Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, «Институт фотонных технологий» РАН
[2]Федеральное государственное бюджетное учреждение «Российский онкологический научный центр им. Н. Н. Блохина» Минздрава России
e-mail: khaydukov@mail.ru

Нанокомплексы на основе нетоксичных компонентов использованы для эффективной глубокой фотодинамической терапии и диагностики раковых опухолей. В качестве универсальной платформы нанокомплексов использованы апконвертирующие наночастицы. Апконвертирующие наночастицы, а именно нанокристаллы $NaYF_4$ солегированные ионами лантанидов, способны переизлучать более коротковолновые фотоны при возбуждении в ближней инфракрасной области спектра в окне прозрачности биологической ткани [1]. Показано, что комплекс, состоящий из апконвертирующей наночастицы и эндогенного фотосенсибилизатора позволяет эффективно нарабатывать активные формы кислорода под действием инфракрасного света для уничтожения раковых клеток. Активация эндогенного фотосенсибилизатора происходит за счет безизлучательной резонансной передачи энергии возбуждения от апконвертирующей наночастицы к фотосенсибилизатору. Продемонстрирована возможность синтеза гибридных наночастиц, таких как апконвертирующая наночастица/магнитная наночастица или апконвертирующая наночастица/плазмонная наночастица обеспечивающих мультифункциональность созданных нанокомплексов. Например, доставка и контроль положения могут осуществляться магнитным полем, а фотодинамическое действие комплекса на опухоль может быть усилено за счет электромагнитной или световой гипертермии.

[1] A. N. Generalova, V. V. Rocheva, A. V. Nechaev, D. A. Khochenkov, N. V. Sholina, V. A. Semchishen, V. P. Zubov, A. V. Koroleva, B. N. Chichkov, E. V. Khaydukov // RSC Advances, 2016, 36, 30089-30097.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ФОТОАКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Алпатова А.В., Палто С.П., Юдин С.Г., Лазарев В.В., Блинов Л.М.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: lbf@crys.ras.ru

В последние годы возрос интерес к изучению фотоэлектрических свойств органических материалов с целью использования их для изготовления сравнительно недорогих и гибких электронных устройств нового поколения. В частности, активно изучаются свойства тонких пленок и гетероструктур на основе органических красителей [1]. На данный момент основные способы исследования фоточувствительности таких объектов сводятся к спектральным измерениям фотоэлектрического отклика с помощью дисперсионных спектральных приборов (дифракционных и призменных монохроматоров) ограниченного спектрального диапазона.

Использованный в данной работе новый способ измерения спектральной чувствительности с помощью фурье спектрометра, основанного на новом принципе модуляции оптической задержки [2], позволяет получать данные фотоотклика образцов в очень широкой области спектра, ограниченной лишь спектральным диапазоном кварцевой оптики и источником света. Например, для галогенной лампы диапазон составляет от 2500 до 350 нм. Методика обеспечивает очень высокое отношение сигнал/шум за счет накопления интерферограмм.

С помощью данного метода изучены спектры фоточувствительности гетероструктур на основе фталоцианина цинка *ZnPc* в смеси с фуллереном C_{60}. Смесь наносилась на прозрачные стеклянные подложки методом вакуумного напыления. Нами достигнута квантовая эффективность преобразования, которая в определенных спектральных интервалах составляет более 5% эффективности кремниевых фотодиодов.

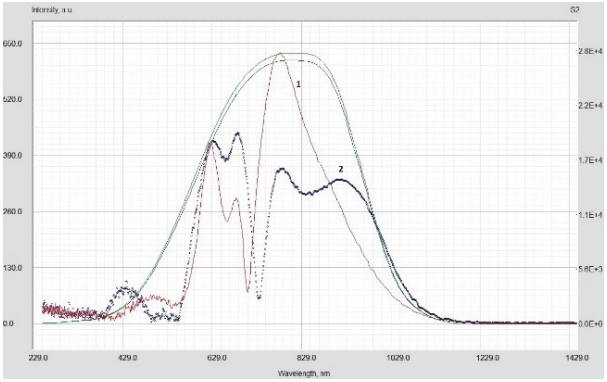


Рис.1. Пример спектров фотоотклика образцов $ZnPcC_{60}$ (кривая 1) и $ZnPcC_{60}$+Si (кривая 2). Гладкие кривые - фотоотклик кремниевого фотодиода (шкала справа).

[1]. В. В. Лазарев, Л. М. Блинов, С. Г. Юдин, С. П. Палто «Фотовольтаический эффект в органическом полупроводнике, управляемый полимерным сегнетоэлектриком» // Кристаллография, 2015, том 60, № 2

[2] С. П. Палто, Л. М. Блинов, С. В. Яковлев, В. И. Вологин, Ю. Н. Шилин «Способ модуляции оптической разности хода в интерферометре Майкельсона для Фурье-спектроскопии и Фурье-спектрометр для инфракрасного, видимого и УФ спектральных диапазонов», Российская Федерация, патент №2239801 Заявка №2002135097, приоритет от 26.12.2002, зарегистрировано 10 ноября 2004.

РОЛЬ МИГРАЦИИ ЭНЕРГИИ В АПКОНВЕРТИРУЮЩИХ НАНОЧАСТИЦАХ И ЕЁ ВЛИЯНИЕ НА ОЦЕНКУ ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕЗОНАНСНОГО БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В ПАРАХ НАНОЧАСТИЦА / ФЛЮОРОФОР

Аляткин С.Ю., Хайдуков К.В., Ашарчук И.М., Семчишен В.А., Хайдуков Е.В.
[1]Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, «Институт фотонных технологий» РАН
e-mail: khaydukov@mail.ru

В работе проведено исследование временной динамики люминесценции апконвертирующих частиц β-$NaYF_4$: 20%Yb^{3+}; 0,6%Tm^{3+} диаметром 150 нм при их возбуждении на длине волны 975 нм. Обнаружено, что существует значительная временная задержка в нарастании сигналов фотолюминесценции, соответствующих различным переходам иона Tm^{3+} в ИК, видимой и УФ областях спектра. Причем времена нарастания совпадают для процессов, в которых задействовано одинаковое количество квантов возбуждения. Изменяя длительность возбуждающего импульса в диапазоне от 50 мкс до 5 мс (с резким задним фронтом), мы показали, что ионы Yb^{3+} выполняют в системе роль аккумуляторов энергии, а сама наночастица действует как единое целое, распределяя запасенное возбуждение посредством кросс-релаксации между ионами Yb^{3+}. Таким образом, наша работа подчеркивает особую роль миграции энергии в апконвертирующих наночастицах. Полученные результаты должны учитываться при теоретическом описании и моделировании процесса апконверсии в наночастицах. Кроме того, в работе мы обсуждаем вопрос о корректности измерения эффективности переноса энергии в паре вида апконвертирующая наночастица-квантовая точка. Время нарастания в кинетике люминесценции апконвертирующих наночастиц может дать дополнительную информацию о происходящих в паре процессах, в то время как анализ неэкспоненциального распада, применяемый для описания резонансного транспорта энергии [1,2], может оказаться затрудненным.

[1] Liu X, Que I, Kong X, Zhang Y, Tu L, Chang Y, Wang T. T, Chan A, Löwik C. W. G. M and Zhang H // Nanoscale, 2015, 7, 14914–14923.

[2] Bednarkiewicz A, Nyk M, Samoc M and Strek W // J. Phys. Chem, 2010, 114, 17535–41.

ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ ТРИБОРАТА ЛИТИЯ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ ПРИМЕСНЫМ СОСТАВОМ И ПОВЫШЕННЫМ СТРУКТУРНЫМ СОВЕРШЕНСТВОМ.

Артюшенко М.Н.., Садовский А.П., Аветисов И.Х.
РХТУ им. Д.И. Менделеева
e-mail: mailmy1990@mail.ru

Улучшение функциональных характеристик нелинейных кристаллов является одной из наиболее важных технологических задач. Кристаллы трибората лития (ЛБО) одни из основных нелинейно – оптических кристаллов. Они сочетают в себе комплекс полезных функциональных свойств, таких как высокое нелинейное удвоение, широкую область прозрачности, высокий порог разрушения, хорошие механические свойства. Внесение легирующих примесей и контроль примесного состава позволяет получить кристаллы с высоким структурным совершенством и улучшенными функциональными свойствами.

Взяв за основу стандартный метод роста из раствора в расплаве при малом температурном градиенте [1], мы вырастили серию объемных кристаллов ЛБО с чистотой 99,999 мас.% по 65 элементам по данным масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. Для исследования влияния примесей на структурные и функциональные свойства кристаллов были выращены кристаллы, содержащие контролируемые концентрации примесей Na, K, W на уровне 10^{-3}-10^{-2} мас.%. Выполнен анализ распределения примесей по объему кристаллов и изучено их влияние на структурное качество кристаллов и оптические свойства.

[1] Маноменова В. Л., Руднева Е. Б., Волошин А. Э. // Успехи химии, 2016, том 85, с. 585-591.

СТРУКТУРА, ОПТИЧЕСКИЕ И СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛЕГИРОВАННОГО МЕДЬЮ И МАРГАНЦЕМ СУЛЬФИДА ЦИНКА, ОСАЖДЕННОГО НА ПОРИСТЫЕ МАТРИЦЫ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Валеев Р.Г.[1], Чукавин А.И.[1], Бельтюков А.Н.[1], Федотов А.Ю.[2], Ветошкин В.М.[1], Тригуб А.Л.[1,3]
[1] ФТИ УрО РАН
[2] ИМ УрО РАН
[3] НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: rishatvaleev@mail.ru

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

В работе получены образцы ZnS, легированного Cu и Mn с содержанием последних 5 и 10 ат. %. Синтез проводился вакуумно-термическим методом путем испарения смесей порошков ZnS и CuS, ZnS и MnS [2] для получения ZnS:Cu и ZnS:Mn, соответственно. Предварительно, для определения необходимых параметров осаждения, таких как температура подложки, температура испарителя, расстояние испаритель-подложка, были проведены термодинамические расчеты процессов осаждения данных материалов на пористые матрицы Al_2O_3.

Структурно-фазовый состав и локальная атомная структура исследовались методами рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии. Показано, что в образцах, помимо сфалеритной фазы ZnS, формируются фазы Cu_2S и Mn_2S, отвечающие за появление люминесценции в видимой области спектра. Химический состав и характер химических связей контролировались методом рентгеноэлектронной спектроскопии. Показано, что концентрация легирующего элемента в образцах задается расчетными массовыми концентрациями в смеси испаряемых материалов. По спектрам оптического пропускания, пересчитанным в функции оптической плотности, были определены значения ширины запрещенной зоны. Полученные материалы были использованы для изготовления электролюминесцентных источников света.

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

[1] X. Fang, T. Zhai et al. // Progress in Materials Science, 2011, V.56, p.175.

[2] Р.Г. Валеев, Д.И. Петухов и др. // ФТП, 2016, том 50, № 2, с. 269-273.

МЕТРОЛОГИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ КАЧЕСТВА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Золотухин П.А., Кодесс Б.Н.
ФГУП «ВНИИМС», РОССТАНДАРТ, г.Москва
ЗАО «НИИМВ», г. Зеленоград

Монокристаллические пленки различного назначения формируют часто на монокристаллических подложках с небольшой разницей в параметрах кристаллической решетки, что обеспечивает реализацию эпитаксиального роста. Иногда важно иметь также в составе монокристаллических подложек атомы с похожей химической природой. Одним из критериев качества пленок является близкое соответствие как минимум одного из размеров элементарных ячеек. Характеристика рассогласования параметров для кубической решетки однозначно определяется при измерении межуглового расстояния Брэгговских отражений от подложки и пленки. Метрологическое обеспечение включает в себя аттестованные приспособления и эталонные средства измерений (стандартные образцы дифракционных свойств, СО), для которых фиксируется, например, несколько групп рефлексов различных порядков. В зависимости от назначения могут быть использованы СО - монокристаллы, кремния, сапфира, различных фосфидов и др. Представлены результаты определения соответствия для пленок и подложек с использованием специального приспособления - конструкции типа Бартельса с модернизацией гониометра типового дифрактометра. Юстировка осуществляется за счет наличия нескольких степеней свободы для поворота пластины с пленкой по трем осям и возможности перемещения образца по трем осям. Для СО фиксировались отражения нескольких порядков с учетом определяемых данных о разориентации, а также при необходимости отражения с другими направлениями векторов. Источник излучения снабжен монохроматорами из монокристалла германия, что обеспечивает выделение *K*α1 с малой угловой расходимостью и низкий фон. Для прослеживаемости значений к эталонным средствам измерялись с повышенной точностью характеристики монокристаллов («Xcalibur», MoKα) и мелкодисперсных порошков (Сименс D-500, CuKα) с применением экстраполяционных функций.

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ СМЕШАННО-ЗАМЕЩЕННОГО ПРОИЗВОДНОГО ФТАЛОЦИАНИНА ТИПА A_3B В МОНОСЛОЯХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

Казак А.В.[1,2], Усольцева Н.В.[1], Смирнова А.И.[1], Марченкова М.А.[2,3], Терещенко Е.Ю.[2,3], Якунин С.Н.[3], Рогачев А.В.[3,5]
[1]НИИ наноматериалов Ивановского государственного университета
[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[3]НИЦ «Курчатовский институт»
[4]Санкт-Петербургский государственный университет
[5]Московский институт экономики и математики, национальный исследовательский университет высшей школы экономики
e-mail: alexkazak86@gmail.com

Получение тонкопленочных материалов с контролируемой структурой и заданными свойствами представляет собой важную фундаментальную задачу, имеющую большое значение для развития оптоэлектроники. Низкомолекулярные красители донорно-акцепторного типа, обладающие возможностью вариации их химической структуры, являются перспективными органическими материалами для достижения высокой степени преобразования энергии света в электрическую. Поскольку, задача получения тонких пленок методом Ленгмюра-Шеффера, позволяющим формировать наноструктуры с регулярной надмолекулярной упаковкой, тесно связана с получением стабильных мономолекулярных плавающих слоев, в данной работе определены оптимальные условия этого процесса для мезогенного фталоцианина типа A_3B (1,4,8,11,15,18-гексакис(гексадецилокси)-23,24-дихлорфталоцианина): начальная степень покрытия поверхности воды 18 %, скорость поджатия барьеров 6 см^2/мин. При данных условиях, начиная с площади $A_{мол}$ = 3,9 нм^2, приходящейся на одну молекулу соединения, и поверхностного давления π = 0,4 мН/м, на границе раздела фаз вода/воздух получали стабильную монослоевую структуру. Качество монослоевых структур в процессе эксперимента определялось методом брюстеровской микроскопии и рентгеновской дифракции в скользящей геометрии (GID), структура поверхности сформированных пленок – методом АСМ.

Работа частично поддержана грантами РФФИ (№16-03-00883 и № 16-37-50026).

ПЭМ-АНАЛИЗ СТЕПЕНИ ДЕФЕКТНОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДНЫХ БРОНЗ С ВЫСОКИМ ФОТОТЕРМИЧЕСКИМ ЭФФЕКТОМ

Котванова М.К.[1], Бороненко М.П.[1], Гуляев П.Ю.[1], Омельченко А.И.[2]

[1] *ФГБОУ ВО «Югорский государственный университет»*

[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

e-mail: kotvanova@mail.ru

В работе представлен анализ результатов ПЭМ высокого разрешения (просвечивающий электронный микроскоп JEM-2500SE) кристаллов оксидных бронз нестехиометрического состава Na_xTiO_2 и K_xTiO_2, обладающих фототермическим эффектом, превышающим в 7 раз известный аналог, после импрегнирования их в вязкоупругие биологические ткани [1]. Исследуемые вещества были получены путем термостимулированной интеркаляции атомов K или Na в октаэдрическую структуру TiO_2 в волне горения СВС [2].

Исследуемые структуры представляют собой фазы внедрения. Структурный мотив моноклинной оксидной бронзы Na_xTiO_2 ($0,20<x<0,25$) – цепочки типа ReO_3 с сочленением общими ребрами. Атомы натрия размещаются в центре сильно искаженного куба из атомов кислорода. Бронза K_xTiO_2 ($0,06<x<0,13$) кристаллизуется в структурном типе голландита. Октаэдры TiO_6 сочленяются по ребрам, образуя цепочки. Цепи в свою очередь, связываясь вершинами, образуют трехмерный каркас. В структуре образуются пустоты туннельного типа, которые заполняются атомами калия.

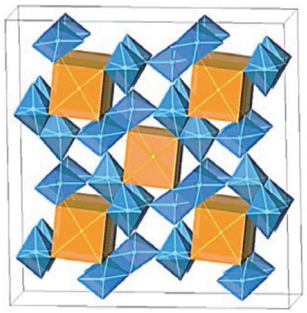


Рис.1 Структура кристалла K_xTiO_2,полученного интеркаляцией атомов калия в решетку TiO_2

Поглощающие свойства и энергетические характеристики исследуемых структур в наноразмерных кристаллах во многом зависят от упругих деформаций кристаллической решетки и концентрации дефектов.

В работе показано, что по мере измельчения в кристаллах оксидных бронз формируются и накапливаются структурные дефекты. Появляются частичные дислокации, или дефекты упаковки атомов, что подтверждает предположение авторов о природе аномального фототермического эффекта.

Работа поддержана РФФИ (грант № 15-42-00106).

[1] Gulyaev P.Y., Kotvanova M.K., Pavlova S.S., Sobol' E.N., Omel'chenko A.I. // Nanotechnologies in Russia, 2012 . v 7, № 3, p 127-131.

[2] Ефремова Н.Н., Котванова М.К., Павлова С.С. // Известия вузов. Химия и химическая технология, 2013 . т 56, вып 9, с 88-91.

ЭФФЕКТИВНАЯ АНИЗОТРОПНАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ В КРИСТАЛЛАХ ТИОФЕН-ФЕНИЛЕНОВЫХ ОЛИГОМЕРОВ

Маннанов А.А.[1,2], Доминский Д.И.[2], Константинов В.Г.[2], Тафеенко В.А.[3], Борщев О.В.[4], Пономаренко С.А.[3,4], Пшеничников М.С.[1], Паращук Д.Ю.[2]

[1] *Институт передовых материалов им. Зернике, Университет Гронингена, Нидерланды*

[2] *Физический факультет и Международный лазерный центр, МГУ*

[3] *Химический факультет, МГУ*

[4] *Институт синтетических полимерных материалов, РАН*

mannanov@phys.msu.ru

Монокристаллы на основе тиофен-фениленовых со-олигомеров (ТФСО) демонстрируют высокий потенциал для органической оптоэлектроники, поскольку они сочетают в себе высокую подвижность носителей заряда и яркую люминесценцию[1]. Эффективность оптоэлектронных устройств существенно зависит от анизотропии оптических свойств кристаллов ТФСО.

В данной работе впервые выполнен рост монокристаллов ТФСО AC5-TMS (Рис.1a) из растворной и паровой фаз, проведен их рентгеноструктурный анализ и исследованы их анизотропные фотолюминесцентные (ФЛ) свойства. Продемонстрировано, что квантовый выход ФЛ монокристалла AC5-TMS превышает 40%. Установлено, что спектры ФЛ кристалла существенно отличаются для X- и Y-поляризованного фотовозбуждения (Рис.1b). Самая интенсивная ФЛ наблюдается для поляризации возбуждения, ортогональной к оси молекул (Y), а ФЛ, в свою очередь, в основном поляризована вдоль молекул (X) независимо от поляризации возбуждения (Рис.1c). Обсуждается взаимосвязь между поляризациями возбуждения и излучения ФЛ в кристалле AC5-TMS.

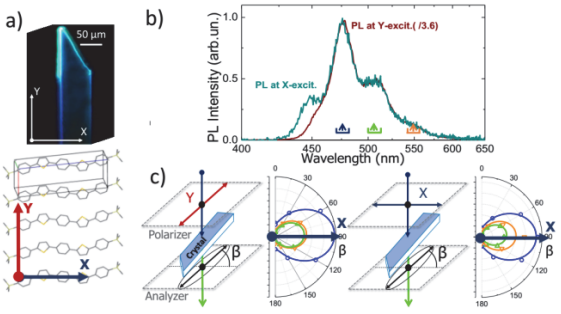


*Рис.1. **(a)** Фотография монокристалла AC5-TMS и схема его молекулярной упаковки;**(b)** Спектр ФЛ для X- (голубая линия) и Y-поляризованного возбуждения, длиной волны 400нм (красная линия);**(c)** Геометрия эксперимента и анизотропия ФЛ для различных спектральных полос (480нм–синяя, 512нм–зеленая, 550нм–оранжевая линия)*

[1] S. Hotta *et al*., *JMCC*, **2** (6), 965 (2014);

ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОИСТЕМ НА ОСНОВЕ НАНОТРУБОК ОКСИДА ТИТАНА

Мурашкина А.А., Михайлов Р.В., Емелин А.В.
Санкт-Петербургский государственный университет
e-mail: murashkina@mail.ru.

В настоящей работе разработаны и исследованы фотоэлектрохимические ячейки на основе двойных и тройных гетеросистем, состоящие из CdS и WO_3 высаженных на тубулярных наноструктурированных подложках TiO_2 двумя способами: электрохимическим и химическим методами. Нанотрубки TiO_2 получали путем электрохимического окисления титана фольги при 60 В в течение 1ч [1]. Химическое осаждение CdS осуществляли из водных растворов солей $CdSO_4$ и Na_2S [2], слой WO_3 был получен в ходе термического разложения $(NH_4)_2WO_4$ при 500°C. Электрохимическое осаждение проводили при соответствующих потенциалах выделения: 1) металлического вольфрама на подложку титана с последующим термическим окислением и 2)иона S^{2-} из раствора сульфита натрия с последующим взаимодействием с ионом Cd^{2+}, присутствующего в электролите. Характеристика полученных структур проводились с помощью измерений РФА, ЭСХА и СЭМ. Исследование спектральной зависимости полученных образцов проводили с помощью потенциометрических измерений при монохроматическом облучении в диапазоне длин волн - 300 - 800 нм.

Согласно РФА, синтезированные образцы имеют кристаллические фазы, соответствующие компонентам гетероструктур (анатаз, CdS, WO_3). Из анализа СЭМ, TiO_2-слой, состоящий из нанотрубок, равномерно распределяется на подложке Ti и его толщина составляет около 1 мм. Нанотрубки TiO_2 ориентированы перпендикулярно к плоскости подложки. Диаметр нанотрубок составляет ~ 70 нм.

Фотоактивность, оцененная из спектральных зависимостей фототока при облучении электродов монохроматическим светом, заметно проявляется в видимой области спектра для гетероструктурных электродов. Возникновение фотоотклика при длине волны ≈ 500 нм для TiO_2/CdS-электрода соответствует краю области собственного поглощения CdS (2.5эВ), для TiO_2/WO_3-электрода при длине волны ≈ 450 нм - краю собственного поглощения WO_3 (2.8эВ). В области собственного поглощения диоксида титана (λ < 380 нм) спектральные зависимости квантовой эффективности фототока имеют типичный для диоксидтитановых электродов вид.

[1] D. Regoninin, F.J. Clemen // Materials Letters 2015, 142, 97–101.
[2] Qingyao Wang, Jianlei Qiao, Shanmin Gao // Journal of Alloys and Compounds, 2014, 613, 292–295.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОНОКРИСТАЛЛА $CdGa_2S_4$, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ХТР

Мустафаева С.Н.[1], Асадов С.М.[2], Гусейнов Д.Т.[1]
[1]Институт физики Национальной академии наук Азербайджана, Баку
[2]Институт химических проблем Национальной академии наук Азербайджана, Баку
e-mail: solmust@gmail.com

Кристаллы $CdGa_2S_4$ обладают широким спектром важных физических характеристик, таких как высокая фото-и рентгеночувствительность. Цель работы - изучение процесса роста монокристаллов $CdGa_2S_4$, электрических и диэлектрических свойств кристаллов в переменных электрических полях, установление механизма переноса заряда, природы диэлектрических потерь и определение параметров, локализованных в запрещенной зоне состояний.

Соединение $CdGa_2S_4$ синтезировано сплавлением исходных компонентов высокой степени чистоты. Монокристаллы $CdGa_2S_4$ были выращены из синтезированного $CdGa_2S_4$ методом ХТР; определили параметры элементарной ячейки: a = 5.555 ± 0.001 Å и c = 10.190 ± 0.001 Å. Изучали также динамику кристаллизации и стабильность межфазной границы процесса роста кристаллов из расплава. При этом учитывали диффузионное перераспределение компонентов в расплаве вблизи межфазной границы.

Диэлектрические коэффициенты $CdGa_2S_4$ измерены резонансным методом. В монокристаллах $CdGa_2S_4$ изучены частотные зависимости действительной и мнимой составляющих комплексной диэлектрической проницаемости, тангенса угла диэлектрических потерь и ас-проводимости (σ_{ac}) в области частот $f = 5 \times 10^4$–3.5×10^7 Гц.

Установлено, что в диапазоне $f = 5 \times 10^4$–3×10^6 Гц в $CdGa_2S_4$ имеют место релаксационные потери, сменяющиеся при $f \geq 3\times10^6$ Гц потерями сквозной проводимости. Во всей изученной области f ас-проводимость $CdGa_2S_4$ подчинялась закономерности $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$, характерной для прыжкового механизма переноса заряда по локализованным вблизи уровня Ферми состояниям. Оценены: плотность $N_F = 3.3 \times 10^{18}$ эВ$^{-1}$·см$^{-3}$ и энергетический разброс ΔE = 30 мэВ этих состояний, среднее время $\tau = 5.7 \times 10^{-8}$ с и расстояние R = 170 Å прыжков.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАРЦА, ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО ИМПЛАНТИРОВАННОГО ЦИНКОМ И ФТОРОМ

Привезенцев В.В.[1], Плотниченко В.Г.[2], Колташев В.В.[2], Штейнман Э.А.[3], Терещенко А.Н.[3], Колесников Н.Н.[3]
[1] *ФТИАН РАН*
[2] *НЦВО РАН*
[3] *ИФТТ РАН*
e-mail: privezentsev@ftian.ru

Наночастицы (НЧ) металлов и их окислов, встроенные в различные матрицы, имеют возрастающий интерес благодаря своим свойствам, которые существенно отличаются от соответствующих для объемного материала. НЧ металлического Zn могут быть использованы в УФ-фотодетекторах. НЧ оксида цинка тоже играют важную роль, так как ZnO является прямозонным материалом с шириной запрещенной зоны 3.37эВ, имеет большую энергию связи в экситоне 60мэВ и др. В данной работе сообщается об оптических свойствах кварца имплантированного Zn и F.

Кварцевые пластины (OH-: 50ppb) были имплантированы последовательно ионами $^{64}Zn^{+}$ и $^{19}F^{+}$ с флюенсом 5×10^{16}/см^2 и энергией 50 и 17 кэВ соответственно. Затем образцы изохронно отжигались в течение 1ч в N_2 в диапазоне 400-800ºC.

После имплантации в спектре ОП наблюдается полоса значительного уменьшения пропускания с центром около 260нм, которая обусловлена наличием металлического Zn. После отжига при температуре 600ºC в спектре ОП образуется небольшой провал при 370нм благодаря появлению фазы ZnO. После отжига при 800°C в видимой области ОП выходит на насыщение и стремиться к 100%, т.к. полностью исчезает фаза металлического Zn. Но при этом имеет место узкая зона уменьшения ОП в диапазоне 370-380нм, соответствующая образованию фазы ZnO.

После имплантации сигнал ФЛ очень слабый с максимумом около 430нм (см. Рис.1), что может быть обусловлено радиационными дефектами в кварце. После отжига при 600°C в спектре ФЛ появляется пик при 370нм, поскольку металлический Zn превратился в ZnO. Однако наблюдается слабая и широкая полоса с центром при 430нм, которая обусловленная дефектами в ZnO. После отжига при 800°C пик ФЛ при 370нм еще больше возрастает. При этом полоса ФЛ с максимумом около 430нм тоже становится больше. Последнее может быть связано с превращением ZnO в фазу Zn_2SiO_4.

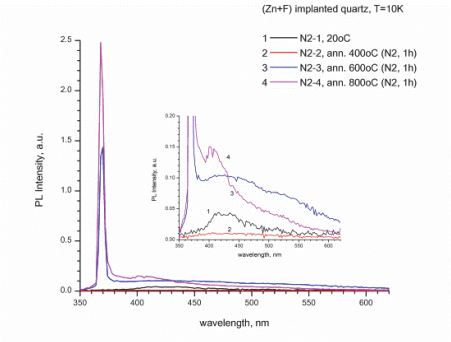


Рис.1. Фотолюминесценция имплантированного и отожженных образцов.

ПРИМЕНЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ НАПРАВЛЕННОГО ДИЗАЙНАТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ КАСКАДНОГО ТИПА

Смирнова А.И., Гиричева Н.И., Усольцева Н.В., Солдатова К.М.
Ивановский государственный университет
E-mail: nv_usoltseva@mail.ru

Синтез низкомолекулярных органических материалов для солнечных батарей каскадного типа является приоритетным направлением в связи с их значительными преимуществами перед полимерными и кремниевыми материалами.

На примере смешанно-замещенных производных фталоцианина (Pc) push-pull типа с различным соотношением донорных (алкилокси-) и акцепторных (Cl-) групп в одной молекуле и разной протяженностью алкокси-заместителей, мы поставили задачу минимизации барьеров дырочной проводимости от одного производного Pc к другому в модельной солнечной батарее. Для молекул Pc A_3B типа (где A – донорный фрагмент, от метокси- до бутокси-; B – акцепторный фрагмент, 2Cl- или 4Cl-) методом DFT/B3LYP/6-311++G** выполнена геометрическая оптимизация, определены значения энергий граничных орбиталей и ширины запрещенной зоны ΔE.

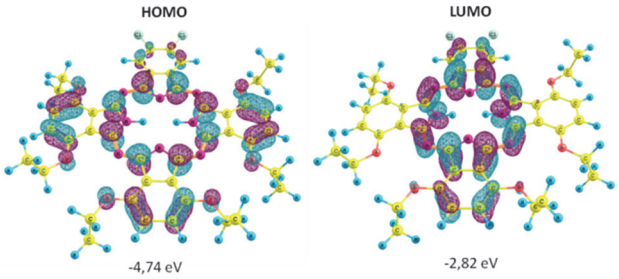


Рис. 1. Вид и энергии граничных орбиталей для Pc с двумя Cl-заместителями на примере этилокси-гомолога.

Установлена зависимость величины ΔE от протяженности алкилокси-заместителей и числа Cl-акцепторов в молекуле. Оцененные нами значения ширины запрещенной зоны для производного Pc с шестью гексадецилокси- и двумя Cl-заместителями (обозначение $PcCl_2$) в молекуле составили 1,92 эВ. Введение еще двух акцепторных Cl-заместителей (обозначение $PcCl_4$) снижает величину ΔE до 1,85 эВ. На основании рассчитанных энергий граничных орбиталей и величин ΔE, мы предлагаем следующую последовательность гетероструктур в модельной солнечной батарее: ITO/$PcCl_2$/$PcCl_4$/C_{60}/Al, исследования фотоэлектрических свойств которой находятся в согласии с расчетными данными [1].

Работа поддержана программой Минобрнауки РФ (грант №4.106.2014К) и РФФИ (грант №16-03-00883а).

[1] Усольцева Н.В. и др. // Жидкие кристаллы и их практическое использование, 2015, том 15, № 4, с. 56–71.

АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ AgAu, ПРИГОТОВЛЕННЫХ В СИЛИКАТНОМ СТЕКЛЕ С ПОМОЩЬЮ УФ ЛАЗЕРА.

Срабионян В.В.[1], Авакян Л.А.[1], Прядченко В.В.[1], Хеинц М.[3], Бугаев А.Л.[1], Яблуновский К.А.[1], Каптелинин С.Ю.[1], Зубавичус Я.В.[2], Дюбель М.[2], Бугаев Л.А.[1]

[1] ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Университет Мартина-Лютера, кафедра физики, Халле, Германия

vvsrab@sfedu.ru

Наночастицы серебра и золота на поверхности и в объеме диэлектрических сред интенсивно изучаются, во многом, благодаря уникальным линейным и нелинейным оптическим свойствам, обусловленным наличием у наночастиц поверхностного плазмонного резонанса (surface plasmon resonance – SPR). Параметры SPR наночастиц, такие как структура резонансной линии, энергетические положения и ширины ее особенностей зависят от состава, размера, формы и атомного строения наночастиц, степени их агломерации и диэлектрических свойств окружающей среды [1]. В настоящей работе направленные массивы плазмонных биметаллических наночастиц AgAu в приповерхностном слое силикатного стекла создаются в результате ионного обмена $Ag^+ \leftrightarrow Na^+$ и последующего облучения поверхности УФ лазером с изменяющимся числом импульсов. Изучение зависимости характеристик SPR и атомной структуры наночастиц от числа лазерных импульсов выполнено методами оптического поглощения в видимой области, спектроскопии рентгеновского поглощения в протяженной энергетической области над краем (EXAFS), рентгеновской дифракции (XRD). Для получения информации о локальном окружении атомов одного типа, имеющих различный характер ближнего окружения в соединении, использовалась оригинальная методика определения атомного строения биметаллических наночастиц [2]. Установлена зависимость параметров SPR от числа лазерных импульсов, а также показано, что при увеличении числа лазерных импульсов растет доля связей Ag-Au, и формируются структуры типа «ядро оболочка», расположенные в приповерхностном слое в виде агломератов наночастиц AgAu.

[1] Heinz M., Srabionyan V. V., Bugaev A.L., Pryadchenko V. V., Ishenko E. V., Avakyan L.A., Zubavichus Y.V., Ihlemann J.d, Meinertz J.d, Pippel E, Dubiel M., Bugaev, L.A. // J. Alloys Compd., 2016, 681, 307–315.

[2] Pryadchenko V. V., Srabionyan V.V., Mikheykina E.B., Avakyan L.A., Murzin V.Y., Zubavichus Y. V., Zizak I., Guterman V.E., Bugaev, L.A. // J. Phys. Chem. C., 2015, 119, 3217–3227.

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОКАЧЕСТВЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ СЛОЖНЫХ МОЛИБДАТОВ МЕТОДОМ ИЗ РАСТВОРА В РАСПЛАВЕ

Сухарев В.А., Садовский А.П., Суханова Е.А., Аветисов И.Х.

РХТУ им. Д.И. Менделеева

e-mail: porto2109@gmail.com

Получения сложных многокомпонентных кристаллов различного состава с высоким качеством с каждым годом становится все более приоритетной задачей. Классические подходы к росту кристаллов не могут удовлетворить растущие потребности промышленности. Инженерам приходится разрабатывать новые подходы для получения кристаллов при снижении производственного цикла, без потери, а зачастую и с повышением качества выращиваемых кристаллов.

Область применения кристаллов сложных молибдатов весьма широка. Их применяют в качестве сцинтилляторов, детекторов двойного β-распада, датчиков «темной материи» [1]. Кристаллы молибдатов обладают неплохими акустооптическими качествами с добротностью, приближающейся к кристаллам диоксида теллура. В настоящей работе решалась задача по выращиванию кристаллов сложных молибдатов с улучшенными структурными характеристиками при сокращении времени выращивания.

Для получения структурно-совершенных кристаллов была выбрана методика, позволяющая осуществлять рост по механизму гранного роста кристалла в сверхнизком градиенте температуры. Особое внимание было уделено примесной чистоте реактивов, так как наличие примесей в расплаве способствует образованию дополнительного пограничного слоя в слое «кристалл-расплав», приводит к снижению скорости роста и ухудшает качество кристалла. В качестве исходных веществ мы использовали реактивы чистотой 4-5N. Так как рост велся в открытом тигле, то ростовая установка была размещена под специальным куполом с очистным фильтром, который обеспечивал запыленность в объеме под куполом порядка 10^1 частиц/м^3. Средняя объемная скорость роста составила 10 г/сутки из 300мл объема. Выращенные кристаллы отличались пониженной плотностью дислокаций 70-100 шт/см^2 на различных гранях. Полученные кристаллы пригодны для изготовления оптических элементов.

[1] V.N. Shlegelh, V.I. Tretyakc, M. Velazquezj. et.al. // Astroparticle Physics, 2016, № 72, с 38-45.

РАЗРАБОТКА АРХИТЕКТУРЫ И ЭЛЕМЕНТНОЙ БАЗЫ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ МЕЖСОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ

Хайдуков К.В.[1], Сарычева М.Е.[2], Соколов В.И.[1], Ашарчук И.М.[1]

[1] Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, «Институт фотонных технологий» РАН

[2] Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский технологический университет»

e-mail: haidukov_11@mail.ru

В последнее время значительный интерес уделяется методам формирования полимерных оптических волноводных структур и устройств на печатной плате из-за их возможности применения в оптической связи, оптических межсоединений и интегральной оптики [1]. Мы представляем изготовление периодических субволновых элементов (брэгговских решеток) в полимерных композитных материалах с введенными наночастицами [2]. Разработка и создание волноводных лазеров на видимый диапазон, усилителей для телекоммуникационного С - диапазона на основе фотополимеров с внедренными нанофосфорами (НАФ). Нанофосфоры представляют собой кристаллическую матрицу $NaYF_4$, $NaLuF_4$ $BaYF_5$, легированную редкоземельными ионами Yb^{3+} Er^{3+} Tm^{3+} Ce^{3+}. НАФ обладают интенсивной фотолюминесценцией в видимой и ИК областях спектра при возбуждении излучением с длиной волны 970-980 нм. Такие оптические волноводные элементы востребованы при создании суперкомпьютеров для передачи данных между процессорами (чипами) и внутри чипа.

[1] Назаров М.М., Хайдуков Е.В., Савельев А.Г., Соколов В.И., Ахманов А.С., Шкуринов А.П., Панченко В.Я. // Российские нанотехнологии, 2015, 10, № 3-4, с 58-63.

[2] Назаров М. М. , Хайдуков К. В. , Соколов В. И. , Хайдуков Е. В. // Квантовая электроника, 2016, 46:1, с 29–32.

ДИЗАЙН И СИНТЕЗ ДИФТОРБОРИНОВ 6-АЦЕТИЛ-2-ЦИКЛОГЕКСЕНОНА – ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ (OLED)

Хачатрян Д.С.[1], Бойко И.И.[2], Колотаев А.В.[1], Матевосян К.Р.[3]

[1] ФГУП «ИРЕА», г. Москва

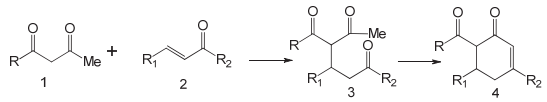
[2] ООО «ТЕХНОЛОГ», г. Переславль Залесский

[3] РХТУ им. Д.И.Менделеева, г. Москва

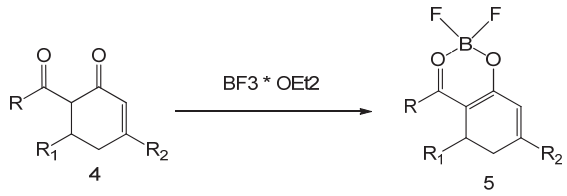
e-mail: derenik-s@yandex.ru

Настоящая работа является продолжением наших исследований[1,2] в области синтеза новых производных 2-циклогексенона по реакции Михаэля в присутствии карбоната калия. Особый интерес представляют производные 2-циклогексенона, содержащие ацетильный заместитель в положении 6 - аналоги 1,3-дикетонов, способные к комплексообразованию с переходными и редкоземельными металлами [3,4,5].

Нами были разработаны препаративные методы получения 3,5-дизамещенных 6-ацетил-2-циклогексенонов, основанных на реакции циклоконденсации ацетилацетона (**1**) с α,β-непредельными кетонами **2** под действием каталитических количеств карбоната калия при кипячении в различных растворителях[6].



В спектрах ЯМР ^1H всех полученных дикетонов 4 наблюдается удвоение всех ожидаемых сигналов, что, как известно[5], обусловлено кето-енольной таутомерией, т.е 6-ацетил-2-циклогексеноны в растворе ведут себя как классические 1,3-дикетоны.



На основании этой информации была проверена хелатообразующая способность веществ 4. Установлена их способность образовывать борхелатные комплексы – 1,3-диоксаборины, которые обладают фотосенсибилирующими свойствами[5], а также комплексы с металлами (Cu^{2+}, Ni^{2+}, Co^{2+}, Eu^{3+}) [4,6]. Изменением свойств заместителей (R, R1, R2) найдены кореляционные зависимости структура-область сенсибилизации.

1. Н.М.Морлян, Д.С. Хачатрян, Ш.О. Баданян, Арм. хим. ж. 1978, **31**(2)**,** 866.

2. Д.С. Хачатрян, А.А. Вардапетян, и др. // ЖОрХ. 1990, **26(10),** 2092.

3. И.И. Бойко, Д.С. Хачатрян, и др.. А.с.1704446 СССР; Бюл. изобр., 2000, 9.

4. V.I.Zelenov, Russian J.Gen.Chem. 2009,**79(1),**142.

5. J.K.F.Geirsson, A.D.Gudmundsdottir, Synthesis, 1990, **11,** 993.

6. Д.С.Хачатрян, К.Р.Матевосян и др. // *Изв. АН. Сер. хим.*, 2015, № 2, 385.

ЭФФЕКТ ДЕМБЕРА В НЕВОДНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛИОТРОПНЫХ ФАЗАХ: НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУР ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ

Яблонский С.В.[1], Боднарчук В.В.[1], Блинов Л.М.[1], Пантюшов В.В.[2]

[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,
[2] Кафедра факультетской хирургии №1 лечебного факультета ГБОУ ВПО РНИМУ им. Н.И. Пирогова ГКБ
e-mail: yablonskii2005@yandex.ru

Жидкокристаллические сегнетоэлектрики в лиотропных фазах известны на примере мембранообразующего фосфолипида дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ) с добавкой холестерина, как хиральной примеси, и этиленгликоля, как растворителя [1]. В этой системе в 1988г. наблюдали пьезоэлектрический эффект, используя метод пульсирующей капли [1]. Недавно с помощью этого метода обнаружили пьезоэлектрические свойства фосфолипида, представляющего собой индивидуальное хиральное соединение. Метод пульсирующей капли позволяет измерять температуру фазовых переходов хиральных липидных систем. Предлагается новый метод измерения температур фазовых переходов не требующий наличия хиральности в системе.

В работе исследовался эффект Дембера в слабом электролите на основе этиленгликоля с добавкой ДПФХ и красителя Оксазина 1. Неводные лиотропные фазы были получены добавлением 50% этиленгликоля к 48,7% ДПФХ и 1.3 % красителя Оксазина 1. Фотогальванический ток индуцировали импульсным воздействием света от полупроводникового светодиода (GaAr, 660 нм). Типичный фотоэлектрический отклик на прямоугольную ступеньку света показан на рис.1а. Связь между температурной зависимостью фотоэлектрического отклика и фазового состояния фосфолипидов показана на рис.1б.

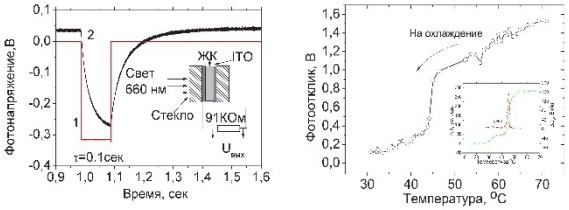


Рис1. а) Фотоэлектрический отклик, индуцированный прямоугольным импульсом света. На вставке: ЖК-ячейка и измерительная схема; б) Амплитуда фотоэлектрического отклика. На вставке: Энтальпия ΔH и теплоёмкость Cp ДПФХ в зависимости от температуры.

В работе впервые наблюдали эффект Дембера в неводных ламиллярных лиотропных фазах ДПФХ. Фотоэлектрический метод позволяет детектировать как предпереходный фазовый переход L_β - P_β' так и главный переход P_β' - L_α в липидных мембранах.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда № 14-12-00475.

[1] L.M. Blinov and others //Pis'ma Zh. Eksp.Teor.Fiz. 1988, V.48, No.5, 259-262.

Микросимпозиум 2. Сверхпроводники и сверхпроводящие структуры

ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ НАНОКЛАСТЕРНЫЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ СИСТЕМЫ С УПРАВЛЯЕМЫМИ ТОПОЛОГИЕЙ И СОСТАВОМ – ВОЗМОЖНОСТЬ СОЗДАНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СТРУКТУР НА НОВЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПАХ

Аракелян С.М., Кучерик А.О., Кутровская С.В., Осипов А.В., Хорьков К.С., Истратов А.В.

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых

E-mail: arak@vlsu.ru

Выявлены квантовые коррелированные состояния в нанокластерных полупроводниковых/металлических структурах при регистрации прыжковой/туннельной электропроводимости; возможные механизмы их проявления рассмотрены как в эксперименте, так и в теории. С помощью различных лазерных методов получены наноструктурированные тонкие пленки на подложках, для которых возможность управления их свойствами реализуется из-за разной топологии/симметрии. Измерены зависимости для вольт-амперных характеристик и электросопротивления в нанокластерных полупроводниковых и биметаллических тонких пленках разного состава.

Особое внимание уделено возможности высокотемпературной сверхпроводимости в таких нанокластерных структурах. Зарегистрировано заметное увеличение электропроводимости в зависимости от граничных условий в топологически упорядоченных кластерных системах. Подобные системы на поверхности твердого тела являются, во-первых, стабильными, и, во-вторых, в них могут реализовываться различные (нефононные) механизмы спаривания электронов. Эти структуры рассматриваются в рамках двух моделей: локальной модели для волновых функций электронов аналогично резонансам Ми в оптике и плавно изменяющихся пространственных структур характерных для Брэговского резонанса. В последнем случае реализуются нелокальные интерференционные эффекты, и можно говорить о дальнем порядке – корреляции электронов в определенных пространственных направлениях. Проблема состоит в определении оптимальных численных соотношений между топологическими параметрами для получения требуемых диаграмм направленности для резкого роста электропроводимости.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА NB_3SN ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЛУЧЕНИЯ БЫСТРЫМИ ПРОТОНАМИ

Васильев А.Л.[1], Балларино А.[5], Боттура Л.[5], Гаврилкин С.Ю.[2], Дегтяренко П.Н.[1,4], Каратеев И.А.[1], Круглов В.С.[1,3], Латушкин С.Т.[1], Лунев А.В. [1], Рязанов А.И.[1,3], Семенов Е.В.[1], Унежев В.Н.[1], Флюкегер Р.[5], Шавкин С.В.[1]

[1]НИЦ «Курчатовский Институт»

[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

[3]НИЯУ МИФИ

[4]ОИВТ РАН

[5]ЦЕРН

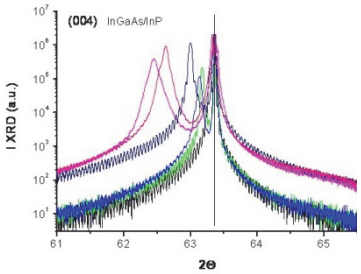
Сверхпроводящий интерметаллид Nb_3Sn является одним из наиболее перспективных материалов, которые используются при проектировании сверхпроводящих магнитных систем (СМС) для нового поколения ускорительной техники и термоядерных реакторов. В процессе работы СМС сверхпроводник подвергается интенсивному воздействию облучения высокоэнергетичными частицами. В результате критические параметры сверхпроводника изменяются. Для понимания природы изменения этих параметров необходимо детальные исследования их характеристик, возникающих при облучении, используя самые современные методы измерения магнитных и структурных характеристик. В настоящей работе представлены результаты исследования намагниченности, магнитной восприимчивости, а также проведен микроструктурный анализ образцов сверхпроводящего интерметаллида Nb_3Sn в виде пластин толщиной от 120 до 220 мкм, до и после облучения быстрыми протонами с энергией протонов около 12,4 и 12,8 МэВ и флюенсом частиц до 10^{18} прот./см^2, а также в виде коммерческих провод диаметром от 0,7 до 1,0 мм с энергией протонов около 32 МэВ и флюенсом частиц до 10^{18} прот./см^2. По результатам исследования облученных образцов обнаружено, изменение сверхпроводящих характеристик для обоих типов образцов (увеличение критической плотности тока вплоть до флюенса 10^{17} см$^{-2}$ и монотонному снижению критической температуры с ростом флюенса). Для понимания природы изменения характеристик также проведен микроструктурный анализ. Обсуждаются полученные результаты экспериментов с учетом расчета профиля радиационных повреждений в облученных образцах Nb_3Sn пластинок.

МЕТРОЛОГИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗОМОРФНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ НА ПОДЛОЖКАХ InP МЕТОДОМ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Васильевский И.С., Виниченко А.Н., Грехов М.М., Каргин Н.И.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Научно-образовательный центр по направлению «Нанотехнологии», mmgrekhov@mephi.ru

В технологии наноразмерных гетероструктур A^3B^5, получаемых методом МЛЭ, состав слоев тройных соединений является важнейшим технологическим и структурным параметром. Он определяет как величину разрывов энергии зоны, эффективную массу носителей тока, так и в случае решеточно-рассогласованных материалов - механическую деформацию слоя. В гетеросистеме $In_yGa_{1-y}As/In_xAl_{1-x}As$, изоморфной подложке InP при $x = 0.52$, $y = 0.53$, содержание InAs в соединениях необходимо контролировать с большой точностью, поскольку отклонение от изоморфного состава приводит к деформациям растущего слоя. В случае сильной деформации возникает релаксация с образованием дислокаций несоответствия и прорастающих дислокаций, которые снижают подвижность электронов в квантовых ямах $In_yGa_{1-y}As/In_xAl_{1-x}As$ [1,2].



Рентгенодифракционный анализ является одним из прецизионных методов контроля состава слоев тройных соединений [3]. В данной работе методом двухкристальной высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии проводили постановку и метрологическое обеспечение технологии гетероструктур $In_yGa_{1-y}As/In_xAl_{1-x}As||InP$ в наноцентре НИЯУ МИФИ (рис. 1).

Таким образом, в НИЯУ МИФИ проведена комплексная постановка технологии гетеротструктур $In_yGa_{1-y}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках InP, что позволит изготавливать изоморфные структуры с погрешностью воспроизведения состава не более ±2%. При необходимости на базе отработанной технологии возможно изготовление гетероструктур с псевдоморфно напряженным и составным каналом $In_yGa_{1-y}As$ с $0.53<y<0.8$.

[1] Имамов Р. М., Мокеров В. Г., Пашаев Э. М., Субботин И. А., Федоров Ю. В. Кристаллография. 2005. Т. 50. С. 356-362.

[2] А.Е. Жуков, А.Ю. Егоров, В.М. Устинов, и др. ФТП. 1997. Т. 31, № 1, С. 19-22.

[3] Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография / перевод с англ. И.Л. Шульпиной и Т.С. Артуновой – СПб.: Наука, 2002- 274 с.

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕНТ-ПОДЛОЖЕК ИЗ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ МЕДИ ДЛЯ ВТСП-2

Дегтяренко А.Ю., Овчаров А.В., Головкова Е.А., Дегтяренко П.Н., Иванов А.С., Шавкин С.В.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: Levakhova_AY@nrcki.ru

Производство высокотемпературных сверхпроводников второго поколения является многостадийным сложным процессом, при реализации которого нужно учитывать множество параметров материалов, чтобы достичь высоких значений критического тока. Выбор металлической ленты-подложки, отвечающей с одной стороны за механические свойства, с другой стороны за текстуру наследуемую к сверхпроводящему слою YBCO - один из важных и основополагающих этапов. На данный момент широко используются биаксиально текстукрированные ленты-подложки на основе никелевых сплавов, но также представляется возможным использование более экономически-эффективных лент-подложек на основе медных сплавов [1,2]. В данной работе были исследованы биаксиально текстурированные ленты-подложки на основе сплавов Cu-1,2%Fe и Cu-1,6at.%Fe (ат.%), изготовленные в Институте физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН [3]. В результате приведённых исследований были получены значения шероховатости поверхности металлических лент-подложек: R_a=17,84 нм и 74,32 нм для Cu-1,2at.%Fe и Cu-1,6at.%Fe, соответственно. По полученным изображениям микроструктуры для Cu-1.2 at.%Fe и Cu-1.6at.%Fe, можно наблюдать выделившиеся дисперсные частицы, преимущественно на основе железа, которые распределены достаточно равномерно в матрице. Размер частиц достигает от 40 до 50 нм. Намагниченность для сплавов при 5K Cu-1,2%Fe и Cu-1,6%Fe (ат.%) составляет $M_s < 0{,}43$ и $M_s < 1{,}05$ мкВб·м·кг$^{-1}$, и при T=77K, $M_s<0{,}15$ и $M_s<0{,}75$ мкВб·м·кг$^{-1}$. При исследования электросопротивления в зависимости от температуры наблюдается линейное падение до температуры 40K, где кривая испытывает излом, а затем наблюдается небольшой рост вплоть до температуры 4,2K, что по всей видимости связано с рассеянием электронов проводимости на примесях. Полученные результаты свидетельствуют о перспективе использования биаксиально текстурированных сплавов на основе меди для получения ВТСП-2 с улучшенным соотношением «цена-качество» на пилотной линии Bruker в НИЦ «Курчатовский институт».

[1] M. Tokudome, T. Doi, R. Tomiyasu, S. Sato, Y. Hakuraku, S. Kubota, K. Shima, N. Kashima and S. Nagaya// J. Appl. Phys. 10, 2008, с 6.

[2] T. Nagaishi, Y. Shingai, M. Konishi, T. Taneda, H. Ota, G.Honda, T. Kato and K. Ohmatsu// Phys. C 469, 2009, с 1311-1315.

[3] Хлебникова Ю.В., Гервасьева И.В., Суаридзе Т.Р., Родионов Д.П., Егорова Л.Ю.//Письма в ЖТФ, 2014, том 40, вып. 19.

МНОГОСЛОЙНЫЕ ВТСП ПЛЕНКИ НА ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ПОДЛОЖКАХ NiW: МОРФОЛОГИЯ, СТРУКТУРА И КРИТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ.

Крылова Т.С., Черных И.А., Куликов И.В., Черных М.Я., Занавескин М.Л.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: krylova-ts@yandex.ru

Падение плотности критического тока с увеличением толщины ВТСП слоя – одна из важных проблем при формировании ВТСП лент второго поколения. С толщиной в пленке накапливаются структурные несовершенства, такие как поры и a-ориентированные кристаллиты. Для решения этой проблемы был предложен подход, заключающийся в формировании многослойных ВТСП пленок на основе сверхпроводящего материала $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, в которых интерслои из материалов с кубической решеткой и более простой стехиометрией разделяют тонкие слои ВТСП. Методом импульсного лазерного осаждения на металлических текстурированных подложках были сформированы многослойные ВТСП структуры с интерлоями из материала титаната стронция. Архитектура многослойной структуры представляет собой ВТСП слои толщиной 250 нм, разделенные слоями $SrTiO_3$ толщиной 10-50 нм, общая толщина ВТСП слоя – 1 мкм. Применение подхода по формированию многослойных структур позволило предотвратить накопление несовершенств в пленке: менее развит рельеф поверхности, уменьшилась доля a-ориентированных кристаллитов уменьшилась, токонесущая способность пленки увеличилась на 60%. Обнаружены разрывы в интерслоях близи границ между зернами, которые служат каналами для накислораживания нижних ВТСП слоев и для перетекания тока между сверхпроводящими слоями в многослойной структуре. Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №16-32-00108 мол_а).

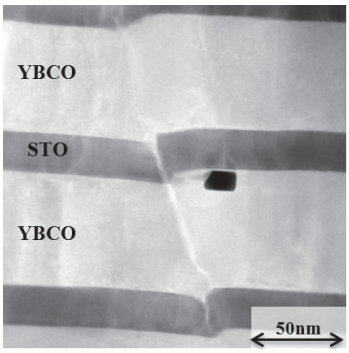


Рис.1. Изображение структуры многослойной ВТСП пленки, полученное с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии.

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ НА КРИТИЧЕСКИЙ ТОК СЛОИСТЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕХПРОВОДНИКОВ С ПРОТЯЖЕННЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Максимова А.Н., Кашурников В.А., Руднев И.А., Одинцов Д.С.

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

e-mail: nastymaksimova@yandex.ru

Численным моделированием (методом Монте-Карло) анализировались транспортные свойства слоистого высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) с точечными, колумнарными и колумнарными наклонными дефектами. Получены убывающие зависимости критического тока от наклона дефектов, причем зависимость исчезает с ростом анизотропии □. Такой эффект можно объяснить особенностями закрепления вихрей на составляющий протяженный точечных дефектах: при низкой анизотропии смещение пэнкейков в соседних слоях требует энергии, большей, чем глубина ямы дефекта. Транспортные характеристики рассчитывались методом, развитым в работе [1].

Сделана попытка учесть в расчете наклон внешнего магнитного поля H по отношению к оси c, перпендикулярной сверхпроводящим слоям. Рассчитаны зависимости критического тока от наклона поля при различной абсолютной величине H. Полученные зависимости качественно согласуются с результатами экспериментов [2,3].

[1] D. S. Odintsov, I. A. Rudnev, V. A. Kashurnikov // JETP, 2006, vol. 103, no. 1, pp. 66-76

[2] Guo Min Zhang, Liang Zhen Lin, et. al. // Physica C, 2003, 390, pp. 321–324

[3] Y. Zhang, E.D. Specht, et. al. // Physica C, 2009, 469, pp. 2044–2051.

ВЛИЯНИЕ НАНОДОБАВОК НА ЛОКАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ ВТСП-ЛЕНТ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ

Менушенков А.П.[1], Руднев И.А.[1], Иванов В.Г.[1], Осипов М.А.[1], Кауль А.Р.[2], Чепиков В.Н.[2], Mathon O.[3], Monteseguro Padron V.[3]

[1] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[2] Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова

[3] European Synchrotron Radiation Facility

e-mail: apmenushenkov@mephi.ru

Известно, что внедрение нанодобавок в тонкие эпитаксиальные слои высокотемпературных (ВТСП) проводников в качестве искусственных центров пиннинга является эффективным методом повышения токонесущих способностей ВТСП-лент 2-го поколения. При этом практически отсутствует информация о характере взаимодействия таких центров с кристаллической решеткой ВТСП- матрицы на локальном уровне. В представленной работе исследованы изменения локальной кристаллической структуры ВТСП эпитаксиальных пленок на основе $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ и $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при внедрении нанодобавок $BaZrO_3$ и $BaSnO_3$. Измерения проведены локально-чувствительным методом рентгеновской спектроскопии поглощения (EXAFS) на линии BM23 Европейского центра синхротронных исследований ESRF (Гренобль, Франция) в температурном диапазоне 15 – 300 K. Изучались ВТСП-ленты, изготовленные двумя методами: импульсным лазерным осаждением (PLD) и молекулярной эпитаксией (MOCVD).

Исследование температурных зависимостей EXAFS-спектров выше *K*-Cu края поглощения позволило селективно разделить влияние внедрения нанодобавок разной концентрации на ближайшее локальное окружение атомов меди из координационных сфер кислорода, иттрия, бария и меди. Получены данные о влиянии нанодобавок на статические факторы локального разупорядочения и жесткости межатомных связей выделенных пар атомов. Анализ EXAFS- спектров выше *K*-Zr и *K*-Sn краев поглощения позволил установить параметры локального окружения циркония и олова в зависимости от типа ВТСП-матрицы и концентрации нанодобавок. Сделаны выводы об эффективности нанодобавок в качестве искусственных центров пиннинга.

МЕССБАУЭРОВСКИЙ СЕНСОР МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В ГИДРИДАХ С РЕКОРДНЫМИ КРИТИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ

Троян И.А.[1], Гаврилюк А.Г.[1,2], Любутин И.С.[1]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Институт ядерных исследований РАН

e-mail: itrojan@mail.ru

Поиск сверхпроводимости с высокими критическими параметрами является одним из главных вызовов современной науки. Данная работа посвящена исследованию сверхпроводимости в сероводороде, в котором при высоком давлении предсказываются рекордные значения критической температуры (выше 200 К). Нами предложен и реализован новый метод, основанный на эффекте Мессбауэра, который позволяет прямыми измерениями установить наличие сверхпроводимости [1]. Идея метода основана на многолетних исследованиях по эффекту Мессбауэра на диамагнитных атомах олова в ИК РАН [2]. Детектором магнитного потока является тонкая оловянная фольга, обогащённая мёссбауэровским изотопом Sn-119. Фольга размещалась в рабочем объеме камеры высоко давления с алмазными наковальнями DAC, который затем заполнялся сжиженным сероводородом, в результате чего оловянная фольга была погружена в H_2S. Ядра мёссбауэровского изотопа Sn-119 являются высокочувствительными датчиками внешнего магнитного поля [2], однако из-за микронных размеров образца возникла необходимость использовать метод синхротронной мессбауэровской спектроскопии, в котором пучок излучения можно сфокусировать в пятно микронных размеров. Экспериментально установлено, что при давлении 150 ГПа сероводород эффективно экранирует магнитные поле 0.7 Тесла, которое не проникает в объём образца до температуры 145 К [1]. Это означает, что этот материал является сверхпроводником второго рода с высокими критическими параметрами.

Работа выполнена при поддержке Гос. контракта Минобрнауки РФ № 14.616.21.0068, а также грантами РНФ № 16-12-10464, РФФИ № 14-02-00483 и РАН III.2П.

[1] I.A. Troyan, A. G. Gavriliuk, R. Rüffer, A. Chumakov, A. A. Mironovich, I. S. Lyubutin, D. Perekalin, Science 351 (2016) 1303.

[2] И.С. Любутин, «Метод диамагнитного ядерного зонда в исследованиях магнитных свойств кристаллов» Глава в книге «Физическая кристаллография» (сер. Проблемы современной кристалографии), Изд. НАУКА, М., 1992, (стр. 326-363).

ВОЗМОЖНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА И ИССЛЕДОВАНИЙ ДЛИННОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ВТСП ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ В НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Шавкин С.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: shavkin@mail.ru

НИЦ «Курчатовский институт» является основателем отечественной технической сверхпроводимости, возглавляя организацию работ по всем основным направлениям, включая разработку технических сверхпроводящих материалов и устройств на их основе. В Центре разрабатываются высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) на основе сверхпроводящей керамики, имеющие очевидные преимущества перед низкотемпературными сверхпроводниками при необходимости создавать высокие поля или работать при температурах выше 10-15 К. Технологическим недостатком ВТСП является химическая агрессивность материала, сильная анизотропия токонесущей способности и необходимость создания практически идеальной кристаллографической текстуры (для устранения высокоугловых границ соседних зерен).

С 2010 г в НИЦ «Курчатовский институт» проводятся интенсивные работы по созданию отечественных технологий выпуска длинномерных ВТСП проводов второго поколения, представляющих собой тонкий слой ВТСП на металлических лентах-подложках, с использованием нескольких промежуточных буферных слоев. В Центре установлена лабораторно-экспериментальная пилотная линия, на которой осуществляется полный цикл изготовления проводов, от подготовки ленты-подложки до финальных измерений токонесущей способности готовой сверхпроводящей ленты. Работы ведутся с использованием как поликристаллических лент-подложек (архитектура слоев SS/YSZ/CeO2/YBCO), так и биаксиально-текстурированных подложек, на основе сплава Ni-W (архитектура слоев NiW/Y2O3/YSZ/CeO2/YBCO). Успех в разработках оказался возможен благодаря уникальному междисциплинарному научно-технического комплексу с лучшей в России исследовательско-технологической базой. В докладе представлены примеры применения современных структурных методов для исследования ВТСП, выпускаемых в НИЦ «Курчатовский институт».

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ ЭЛЕМЕНТОВ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО КАБЕЛЯ

Шляхова Г.В.[1,2], Баранникова С.А.[1,3], Зуев Л.Б.[1,3], Ли Ю.В.[1]
[1] Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
[2] Северский технологический институт НИЯУ МИФИ
[3] НИ Томский государственный университет
e-mail: shgv@ispms.tsc.ru

В основе подходов, используемых при анализе ресурса пластичности технических сверхпроводников Nb – Ti [1], лежит представление о равномерности и однородности пластической деформации, что не соответствует современным представлениям, поскольку с самого начала деформирования, зарождающиеся очаги локализации [2] могут приводить в дальнейшем к обрыву сверхпроводящих волокон [3]. В статье приведены результаты исследования структуры элементов сверхпроводящего кабеля на основе сплава Nb – Ti на промежуточной стадии волочения при переходе к диаметру 1,3 - 1,2 мм.

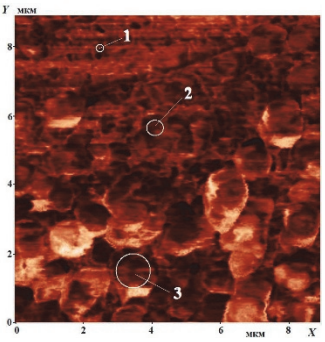


Рис. 1. АСМ-изображение тонкой структуры элементов сверхпроводящего кабеля: 1 - волокно Nb – Ti; 2 – ниобиевый барьер; 3 – медная матрица.

При анализе влияния деформации волочением на структуру многожильного сверхпроводника на основе сплава Nb-Ti обнаружены следующие особенности: 1) в результате интенсивной пластической деформации медь в элементах кабеля приобретает субмикрокристаллическую структуру со средним размером: в сердечнике ~800 нм, в промежуточном слое между волокнами в матрице ~800 нм; 3) выявлен диффузионный Nb барьер вокруг волокон Nb-Ti, размещенных в медной матрице, шириной ~ 250 нм в бездефектной области (Рис. 1).

Литература:

[1] Ажажа В.М., Черный О.В., Сторожилов Г.Е. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники». 2004. № 14. С. 136 – 139.

[2] Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. – Новосибирск: Наука, 2008. – 327 с.

[3] Г.В. Шляхова, С.А. Баранникова, Л.Б. Зуев. Исследование наноструктурых элементов кабеля технических сверхпроводников Nb-Ti // Физика и химия обработки материалов. 2014. № 4. С. 80-88.

ПОТЕРЯ ИНДИВИДУАЛЬНОСТИ ПЕРОВСКИТНОЙ СТРУКТУРЫ YBCO ПРИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ ЗАМЕЩЕНИИ БАРИЯ БЕРИЛЛИЕМ

Эмиров Р.М.[1], Рабаданов М.Х.[1], Сульянов С.Н.[2], Гаджимагомедов С.Х.[1], Атаев М.Б.[3], Палчаев Д.К.[1]

[1]ФГБОУ ВО Дагестанский государственный университет

[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

[3]ФГБУН Дагестанский научный центр Российской академии наук, Аналитический центр коллективного пользования

e-mail: aderron@mail.ru

Работа направлена на установление характера изменения структуры YBCO, обладающего сверхпроводящими свойствами, при технологическом замещении бария (Ba) бериллием (Be). Первоначально предполагалось изовалентным замещением бария бериллием достичь химического сжатия решетки в области гофрированных связей в проводящих слоях YBCO, поскольку размеры бериллия в три раз меньше бария. Однако небольшая доля такого замещения может привести как к замещению иттрия и меди, так и к внедрению атомов бериллия в междоузлье. Бериллий плохо идентифицируется, тем не менее, наличие Be в решетке YBCO должно привести к изменению локального окружения, как при замещениях, так при внедрении его в междоузлье. Поэтому наличие бериллия может обнаружиться в результате искажений исходной структуры YBCO.

Для установления этих искажений методом рентгеновской дифракции (XRD) были проведены исследования фазового состава и структуры образцов YBCO, содержащих от 1% до 15% Be (вместо Ba). При таких замещениях явные изменения (положения пиков и их уширения) ромбической структуры YBCO (из баз данных ICSD и ICDD PDF4+) не обнаруживаются, а выше 15% наблюдается образование новых фаз, таких как $Ba_2Cu_3YO_6$, $BaCuY_2O_5$, $Cu_2Y_2O_5$, а также отдельных оксидов (Ba, Cu, Be). В связи с чем, представляет интерес вопрос, какие изменения структуры в YBCO предшествуют ее распаду на отдельные фазы.

Нами проведен анализ положений пиков, их полуширины (для основной фазы $YBa_2Cu_3O_{7-d}$), относительных интенсивностей основных пиков, а также их изменений в ряду составов с примесью Be от 0 до 15%. По полученным дифрактограммам проведено уточнение кристаллических структур методом Ритвельда. Значения основных структурных параметров составов YBCO с примесью Be, полученных в результате уточнения, а также значения R-факторов (факторов расходимости) приведены в таблице 1.

Таблица 1. Основные структурные параметры составов YBCO при замещениях бария бериллием

примесь (Be), %	$YBa_2Cu_3O_{7-d}$, (P m m m)			R_p	R_{wp}
	a, Å	*b*, Å	*c*, Å		
0	3,8234	3,8868	11,6753	2,93	4,45
5	3,8244	3,8883	11,6871	1,49	2,61
7	3,8219	3,8874	11,6855	1,9	3,01
10	3,8247	3,8871	11,6787	3,58	5,81
15	3,8241	3,8869	11,6822	2,43	4,17

Определены длины связей (Y-Cu, Y-O, Ba-Cu, Ba-O, Cu-Cu, Cu-O,O-O) и углы между атомами для всех составов при соответствующих замещениях Be от 0 до 15%. Проведен анализ и сделана попытка выявления закономерностей их изменения в зависимости от концентрации этой примеси. Бериллию, в отличие от бария, характерно образование ковалентных связей. Изменения положения пиков и их уширение, за счёт повышения дефектности структуры при замещениях всех катионов бериллием или его внедрения в междоузлье, возможно, компенсируются усилением связи между атомами в соответствующих плоскостях.

СТРУКТУРА И ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТОВ MgB_2

Абин Д.А., Минеев Н.А., Осипов М.А., Покровский С.В., Руднев И.А.

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

e-mail: DAAbin@mephi.ru

В настоящее время активно развивается промышленное производство проводов на основе MgB_2. Каждый год создаются десятки новых образцов, с различными структурами, концентрациями примесей и технологическими условия производства. Интерес к развитию данного направления вызван перспективами использования MgB_2 проводов для МРТ магнитов и обмоток ветрогенераторов, и обусловлен относительно высоким значением критической температуры материала MgB_2 $T_c \approx 40$ К.

В данной работе изучались образцы промышленных проводов на основе MgB_2 производства фирмы Columbus Superconductors SpA. Измерены критический ток I_c и намагниченность M с целью определения возможности использования данных проводов для конструирования безжидкостной криомагнитной системы. Особенностью данной системы является малый диаметр сверхпроводящего соленоида.

Были сделаны перпендикулярные срезы проводов. Структура и химический состав срезов были изучены с помощью оптического и электронного сканирующего микроскопов. Было изучено влияние различных изгибных деформаций на свойства проводников. Провода повергались изгибу с различными диаметрами D_b и для каждого значения D_b был измерен критический ток при температуре T=4,2 К в магнитных полях до 14 Тл. Найдены зависимости критического тока от диаметра изгиба $I_c(D_b)$. Полученные зависимости $I_c(D_b)$ были использованы для оптимизации конструкции безжидкостной криомагнитной системы. Для оценки токонесущей способности проводов при промежуточных температурах применялись бесконтактные измерения, а именно, измерения кривых намагниченности. Намагниченность проводов измерялась с помощью вибрационного магнетометра при температурах T=4,2; 10; 15; 20; 25 К в магнитных полях до 14 Тл.

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ТРАНЗИСТОРНЫХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР INALAS/INGAAS ПО ДАННЫМ СЪЕМКИ КАРТ ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Грехов М.М.[1], Пушкарёв С.С.[2], Васильевский И.С.[1], Виниченко А.Н.[1]

[1]*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

[2] *Институт СВЧ полупроводниковой электроники РАН*

e-mail: mmgrekhov@mephi.ru

В технологии создания наноразмерных гетероструктур типа InAlAs/InGaAs ключевое значение имеет структурное совершенство эпитаксиальных слоев и контроль параметров состава тройных соединений. Одним из эффективных методов, решающих данную задачу, является метод высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии, позволяющий определять параметры кристаллической решетки в различных направлениях, оценить степень совершенства эпислоев в гетероструктурах [1-3]. Классические кривые дифракционного отражения (КДО) от симметричного рефлекса, полученные в режиме $\omega/2\theta$ сканирования, дают информацию в основном о параметрах структуры, тогда как карты обратного рассеяния (RSO - reciprocal space mapping) дают представление о степени мозаичности и разориентации эпитаксиальных слоев друг относительно друга [3].

В данной работе исследованы особенности RSO для эпитаксиальных метаморфных структур $In_{0.3}Al_{0.7}As/In_{0.3}Ga_{0.7}As/In_{0.3}Al_{0.7}As$, определены латеральные и нормальные параметры решётки, упругие деформации, степень разориентации слоёв. Исследуемые HEMT-наногетероструктуры были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на установке Riber Compact 21T 3-5 на подложках InP и включали в себя псевдоморфно напряжённую квантовую яму (КЯ) $In_{0.81}Al_{0.19}As/In_{0.90}Ga_{0.10}As/In_{0.81}Al_{0.19}As$ (обр. 155) и $In_{0.84}Al_{0.16}As/InAs/In_{0.84}Al_{0.16}As$ (обр. 164).

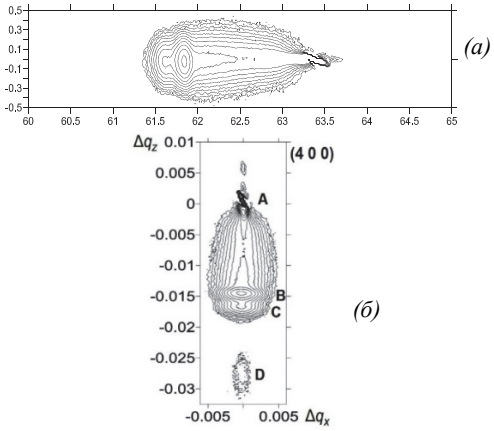


Рис.1. Экспериментальная кривая рассеяния рентгеновских лучей от пика (400) (режим съемки $\omega/2\theta$) от образца 164 - (а); карта обратного рассеяния – (б).

[1] Р.Н. Кютт // Актуальные вопросы современного естествознания. – 2007. – Вып. 5. – С.43–57.

[2] D. Lee, M.S. Park, Z. Tang et. al. // J. Appl. Phys. – 2007. – Vol. 101. – P. 063523.

[3] L.E. Shilkrot, D.J. Srolovitz, J. Tersoff // Appl. Phys. Lett. – 2000. – Vol. 77. – P. 304–306.

НАСЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ПРИ ФАЗОВОМ РАССЛОЕНИИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СПЛАВА Nb-Ti В РЕЗУЛЬТАТЕ СТАРЕНИЯ

Гурьев В.В., Иродова А.В., Васильев А.Л., Зубавичус Я.В., Круглов В.С., Лихачев И.А., Овчаров А.В., Пашаев Е.М., Светогоров Р.Д., Шавкин С.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: GuryevVV@mail.ru

Сверхпроводящие сплавы Nb-Ti широко используются в сверхпроводящих многожильных композиционных проводах, выпускаемых в промышленных масштабах. По этой причине изучение электродинамики этих сплавов является актуальной задачей. В многочисленных исследованиях было показано, что ключевую роль в управлении токонесущей способностью Nb-Ti играет несверхпроводящая фаза, выделяющаяся при искусственном старении в результате длительной термообработки сплава. Частицы этой фазы являются центрами пиннинга, их количество, размер, микроструктура, закономерности формирования определяют качественные характеристики сверхпроводника. В настоящей работе приводятся результаты исследований фазового расслоения в тонкой холоднокатаной ленте состава Nb–50масс.%Ti, подвергнутой искусственному старению при температуре 385 ºС в течении 25 часов. Исследования проводились с использованием рентгеновских методов на специализированных станциях Курчатовского источника синхротронного излучения и современных автоматизированных дифрактометрах, а также методами электронной микроскопии высокого разрешения. Установлено, что в результате термообработки преимущественно на границах зерен выделяется несверхпроводящая α-фаза с ГПУ структурой, которая наследует кристаллографическую текстуру исходной β-фазы с ОЦК структурой в соответствии с законом Бюргерса для мартенситных превращений. При этом общее количество α-фазы увеличивается почти в шесть раз, с менее чем 1 об.% в исходной ленте до 6 об.% после её термообработки. Согласно данным энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии, α-фаза обогащена титаном по сравнению с окружающей β-матрицей.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ВТСП-2 С ИСКУССТВЕННЫМИ ЦЕНТРАМИ ПИННИНГА

Дегтяренко П.Н.[1,3], Круглов В.С.[1,2], Сычугов В.В.[1], Овчаров А.В.[1], Шавкин С.В.[1], Чесноков Ю.М.[1], Васильев А.Л.[1], Волков П.В.[1]
[1]НИЦ «Курчатовский Институт»
[2]НИЯУ МИФИ
[3]ОИВТ РАН
e-mail: sychugovvv@gmail.com

С момента открытия сверхпроводников на основе YBCO керамики проводилось много попыток для использования сверхпроводящих проводов и лент для нужд электроэнергетики. В особенности, это касается высокотемпературных сверхпроводящих лент второго поколения (ВТСП-2) на основе REBCO (RE: Y, Gd, Sm, Nd, Eu и др.), на которые возлагаются большие надежды из-за их высокой токонесущей способности как при температуре кипения жидкого азота, так и при высоких магнитных полях. В представленной работе проведены систематические исследования анизотропии токонесущей способности ВТСП-2 лент в полях до 1 Тл, при температуре 77 и 65К коммерческих ВТСП-2 лент произведенных по технологиям MOCVD и PLD при наличии/отсутствии искусственных центров пиннинга. При температуре 77K, обнаружено, что, во-первых, в разных типах образцов критический ток возрастает в 1,2-1,9 раза при направлении магнитного поля вдоль оси *c*. Во-вторых, при допировании частицами на основе $BaZrO_3$ уменьшается падение критического тока в высоких магнитных полях, по сравнению с недопированными образцами. При этом при температуре 65K критический ток возрастает в 2-2,5 раза. Также были получены изображения на просвечивающем электронном микроскопе (микроскоп TITAN 80-300) поперечных срезов ВТСП слоёв, исследуемых лент. В допированных образцах MOCVD отчетливо наблюдаются колончатые структуры $BaZrO_3$, наклон которых лежит в диапазоне $75\text{-}85^0$ от плоскости подложки. В образцах PLD наблюдается большое количество дислокационных дефектов. Полученные результаты будут использованы для дальнейших исследований токонесущей способности ВТСП-2 лент при облучении высокоэнергетическими частицами с различной энергией и флюенсом.

АСИМПТОТИЧЕСКИ ТОЧНЫЙ МЕТОД ДЛЯ РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ВТСП

Жумагулов Я.В., Кашурников В.А., Красавин А.В.
Национальный Исследовательский Ядерный Университет МИФИ
e-mail: yaros72@live.com

Расчет зонной структуры достаточно больших систем без каких-либо приближений или упрощений является одной из основных задач физики конденсированного состояния. Восстановление спектральной плотности из известной функции Грина является задачей о решении интегрального уравнения Фредгольма первого рода. В реалистичной ситуации функция Грина известна на дискретном наборе времен с некоторой статистической ошибкой в каждой точке. Хорошо известно, что в этом случае задача принадлежит к классу некорректно поставленных задач. Поэтому естественно сформулировать проблему как поиск приближенного решения, которое воспроизводит функцию Грина на конечном наборе времен с некоторым наименьшим отклонением [1]. Настоящая работа представляет метод, основанный на комбинации алгоритмов Монте-Карло и градиентного спуска, который позволяет обойти проблему искажения решения нелинейными членами и подвергает анализу наиболее представительный интервал малых отклонений. Кроме того, метод не содержит источников систематических ошибок и, в принципе, позволяет восстановить любую спектральную функцию с требуемой точностью. Разработанный метод был применен для восстановления электронной плотности состояний и исследования зонной структуры двухорбитальной модели [2], используемой для описания нового класса высокотемпературных сверхпроводников на основе железа, открытых в 2008 г. [3] (Рис. 1).

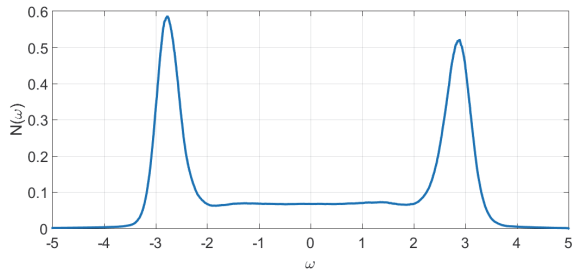


Рис.1. Плотность электронных состояний ВТСП на основе железа, рассчитанная в рамках двухорбитальной модели.

Метод эффективно работает также для металлических нанокластеров и многих других систем.

[1] Мищенко А.С. // УФН, 2005, том 175, с 925-942.

[2] Moreo A., Daghofer M., Riera J. A., and Dagotto E. // Phys. Rev. B, 2009, V. 79, 134502.

[3] Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M. and Hosono H. // J. Am. Chem. Soc., 2008, V. 130, 3296.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОБЛУЧЕНИЯ БЫСТРЫМИ ПРОТОНАМИ НА ИЗМЕНЕНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ Nb_3Sn МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Каратеев И.А., Лунёв А.В., Рязанов А.И., Васильев А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: iakarateev@gmail.com

В качестве обмотки соленоидов промышленных сверхпроводящих магнитов используются композитные провода из волокон Nb_3Sn, погруженных в бронзовую матрицу. Сверхпроводящие свойства этих магнитов определяются структурой самих волокон. При эксплуатации магнитов из сверхпроводящих материалов в Большом Адронном Коллайдере в ЦЕРНе в результате взаимодействия этих материалов с потоком быстрых вторичных частиц структурно-фазовое состояние сверхпроводящих волокон может изменяться. Выделение новых фаз в сверхпроводниках в результате облучения может отрицательно сказаться на физических свойствах сверхпроводников. В работе методами электронной микроскопии выявлены особенности радиационного воздействия на микроструктуру и фазовый состав модельных сверхпроводящих фольг Nb_3Sn после имитационных экспериментов с помощью облучения этих материалов быстрыми протонами с энергиями 10 МэВ на циклотроне НИЦ КИ.

В образцах до и после облучения была обнаружена гетерогенность состава – кроме Nb_3Sn обнаружены преципитаты NbO, $NbSn_2$ и Sn. Установлено, что при облучении размер преципитатов Sn уменьшается, что возможно связано с распылением их поверхностных слоев за счет каскадов атомных столкновений, которые образуются под действием протонного облучения.

Данные электронной дифракции и просвечивающей ЭМ, однозначно показали, что после облучения в материале Nb_3Sn формируются поликристаллические выделения Nb, показанные на рисунке 1, причем с увеличением дозы облучения их размер и плотность увеличиваются.

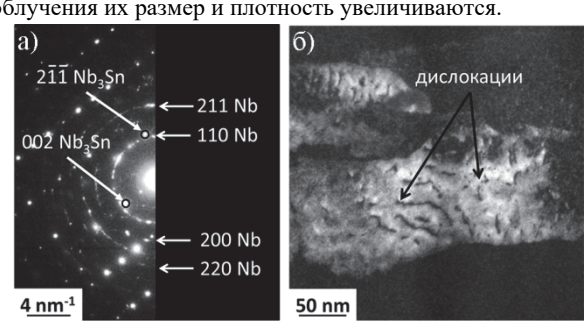


Рис. 1. а) электронограмма от области преципитатов (Titan 80-300); б) темнопольное ПЭМ изображение, полученное в рефлексе Nb (Titan 80-300).

РАСЧЕТ КВАНТОВОГО СОСТОЯНИЯ СВЕРХПРОВОДНИКА В ПЕРИОДИЧЕСКОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Карцев П.Ф., Корчагин Д.С.
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
e-mail: PFKartsev@mephi.ru

Современные достижения физики и техники сверхпроводимости не в последнюю очередь связаны с разработкой композитных сверхпроводящих материалов, таких как ВТСП-ленты 2-го поколения. При использовании ферромагнитных частиц или слоёв в комбинации со сверхпроводником возникают новые физические явления, связанные как с выталкиванием магнитного поля из сверхпроводника (мейснеровской экранировкой), так и его влиянием на концентрацию куперовских пар. Эти явления следует учитывать при разработке приборов сверхпроводящей электроники и материалов для сильноточных применений, использующих системы «сверхпроводник-ферромагнетик».

В работе представлен расчет квантового состояния сверхпроводящей пленки, помещенной в периодическое магнитное поле, создаваемое упорядоченной системой ферромагнитных частиц, расположенных на достаточном удалении от поверхности пленки. Такая геометрия задачи является хорошим модельным приближением как при описании состояния сверхпроводника, помещенного в неоднородное магнитное поле [1], так и при определении параметров магнитных частиц, использующихся в качестве сильных центров пиннинга [2].

Численное решение уравнений Гинзбурга-Ландау в случае периодического внешнего поля позволяет сделать несколько существенных упрощений. Решение данной задачи ведется при помощи метода установления [3]. Обсуждаются применения данного алгоритма к возможным задачам в данной геометрии.

[1] Безотосный П.И., Лыков А.Н., Цветков А.Ю. // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2008. № 58. С. 42-46.

[2] Кашурников В.А., Максимова А.Н., Руднев И.А. // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. Вып. 7. С. 494-500.

[3] Richardson W.B., Pardhanani A.L., Carey G.F. and Ardelea A. // Int. Journal for Numerical Methods Engineering. 2004. Vol. 59. Is. 9. Pp.1251-1272.

РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Красавин А.В., Кашурников В.А., Жумагулов Я.В.
Национальный Исследовательский Ядерный Университет МИФИ
e-mail: avkrasavin@mephi.ru

Открытие высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе железа [1] явилось новым стимулом к выяснению природы сверхпроводимости в сложных соединениях со слоистой структурой. По сравнению с ВТСП на основе меди, соединения на основе железа имеют более сложную фазовую диаграмму, включающую антиферромагнитные, структурные и сверхпроводящие фазовые переходы. Ключевым объектом исследования в настоящее время является выяснение роли электронных корреляций в ВТСП на основе железа, которые, как правило, являются определяющими в формировании физических свойств систем, построенных с участием переходных элементов.

В работе использован квантовый траекторный алгоритм в непрерывном времени (CTWL-алгоритм), адаптированный для полной двухорбитальной модели [2], которая является простейшей моделью для ВТСП на основе железа. Для восстановления спектральной функции и плотности состояний был использован комбинированный метод «градиентный спуск + алгоритм Монте-Карло», специально адаптированный нами для данной задачи. Спектральная функция и полная плотность состояний были восстановлены для всей зоны Бриллюэна для кластеров с размерами от 4×4 до 10×10 ячеек FeAs (Рис. 1). Входным параметром при этом являлись данные для мацубаровской функции Грина, полученные с использованием обобщенного квантового траекторного алгоритма Монте-Карло [2].

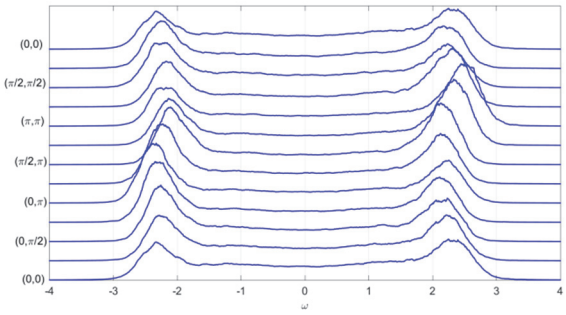


Рис.1. Спектральная плотность электронных состояний ВТСП на основе железа вдоль главных кристаллографических направлений, рассчитанная в рамках двухорбитальной модели.

[1] Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M. and Hosono H. // J. Am. Chem. Soc., 2008, V. 130, 3296.

[2] Кашурников В.А., Красавин А.В. Письма в ЖЭТФ, 2013, т. 97, с. 378.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В НАПРЯЖЕННЫХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЯХ

Кривых А.В., Щербаков В.И., Иродова А.В.
НИЦ "Курчатовский институт"
e-mail: Krivykh_AV@nrcki.ru

Недавно [1], при испытаниях на растяжение сегментов труб из нержавеющей аустенитной стали 316LN-IG, использованных для оболочек проводников тороидальной магнитной системы ИТЭР, в среде жидкого и газообразного гелия был обнаружен магнитоупругий эффект для немагнитной исходной γ-фазы и индуцированной пластической деформацией магнитной α-фазы, образующейся в результате мартенситного превращения. При этом, по мере накопления α-фазы, в образцах наблюдались спорадические локальные понижения температуры в областях, разгруженных при сбросах напряжения в результате деформации сдвига. Было сделано предположение, что понижение температуры возникает в результате магнитокалорического эффекта при адиабатической переориентации магнитных моментов в α-фазе.

В настоящей работе приводятся результаты низкотемпературных испытаний сегментов труб из стали 316L-IG, той же 316-ой серии, предназначенных для изготовления полоидальной магнитной системы ИТЭР, а также образцов в виде гантелей из аустенитной стали ЭП302 для трубопроводов реакторов. В случае стали 316L-IG, с близким по химическому составу к 316LN-IG [1], измерения проводились в среде газообразного гелия на образцах со сварными швами с повышенным содержанием α-фазы. При этом наблюдалось аналогичное поведение всех измеряемых характеристик, в том числе, локальные понижения температуры в разгруженных областях. Испытания стали ЭП302, с большей, чем у сталей 316-ой серии, склонностью к образованию α-фазы, проводились в среде жидкого гелия. Вследствие более интенсивного образования α-фазы при нагружении образцов, локальные понижения температуры наблюдались даже в этом случае, несмотря на более чем двухсоткратное увеличение стабильности поддержания температуры за счет улучшения теплообмена в жидком гелии, по сравнению с газообразным.

Результаты проведенных испытаний подтверждают существование магнитокалорического эффекта в напряженных аустенитных сталях, неустойчивых к мартенситным превращениям.

[1] Кривых А.В., Иродова А.В., Кейлин В.Е. // Журнал технической физики, 2015, том 85, № 1, с 73-79.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ДИБОРИДЕ ХРОМА

Кодесс Б.Н., Самбуева С.Р.
ФГУП «ВНИИМС»
kodess@mail.ru

Распределение электронной валентной плотности (РВЭП) было исследовано на монокристаллах диборида хрома. Сбор данных проведен на дифрактометре Xcalibur (MoK-α излучение, 1200-1400 отражений в полной сфере Эвальда, sin θ\λ=1,177). Уточнены координаты атомов и их анизотропные амплитуды колебаний (пространственная группа P6/mmm, Z=1, число эквивалентов 88- 90). Высокая точность и воспроизводимость результатов (R=0.7-1%) позволила построить карты РВЭП для различных секций элементарной ячейки и сравнить их с теоретическими расчетами из первых принципов. При комнатной температуре a=2,9725(3), c=3,0754(2), c\a= 1.0346, V=23,533(6), r(Cr – B)= 2,3043(2), r(B – B)= 1,7162(1). Анализ карт показывает практически двумерное сотовое распределение плоскостей из атомов бора. Атомы бора локализованы в центре тригональных призм из атомов металла, которые расположены по граням трехмерной структуры. Атомы металла и бора упакованы вдоль оси *c* последовательно. В отличие от сверхпроводящего диборида MgB2 распределение электронной плотности имеет сферических характер; не наблюдалось ковалентных связей между атомами металла и бора. Величина анизотропии тепловых колебаний $A = < u^2 >_{33} / < u^2 >_{11}$ для атома хрома близка к единице. Для атома B обнаружена высокая степень анизотропии колебаний 1.50, что отражает наличие химической связи ковалентного типа. Высокая анизотропия наблюдалась нами ранее для соединений A15, в которых ее степень коррелировала с величиной температуры сверхпроводящего и структурного переходов [1]. В дибориде хрома при понижении температуры обнаружен антиферромагнитный фазовый переход, для которого предполагается механизм магнетизма на свободных электронах.

[1]. Butman L.A., Kodess B.N. Anomalous Variation of Thermal Movement Anisotropy in High T_c A15 Compound at Lowering Temperature. - Solid State Communication, 1993, v. 87, No 8, p. 685-687.

ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ BASNO3 НА ТРАНСПОРТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ВТСП ЛЕНТ GDBA2CU3O7-X

Минеев Н.[1,4], Чепиков В.[2,3], Абин Д[1,4]., Петрыкин В[5]., Покровский С[1,4]., Осипов М.[1,4], Амеличев В.[2], Молодык А.[2], Ли С.[5], Самойленков С.[2], Руднев И.[1,4], Кауль А.[2,3]

[1] Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»

[2] ЗАО «СуперОкс»

[3] Московский Государственный Университет им. Ломоносова

[4] Лаборатория Высоких магнитных полей и Низких Температур

[5] LLC SuperOx

e-mail: namineev@mephi.ru

Работа представляет исследование влияния внедрения искусственных центров пиннинга $BaSnO_3$ (BSO) в сверхпроводящие ленты второго поколения на основе $GdBa_2Cu_3O_{7-x}$.

Образцы были сделаны компанией СуперОкс по технологии импульсного лазерного осаждения. Варьировалось как количество добавки BSO в образцах, от 0 до 7 % (масс.), так и режимы осаждения: температура подложки и частота проходов, для получения лучших транспортных характеристик композита из высокотемпературного сверхпроводника. Присутствие наночастиц BSO было доказано микроструктурными исследованиями с использованием рентгено-дифракционного анализа, сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (для элементного анализа). Их размер составил 6 нм вдоль ab-плоскости и десятки нм вдоль c-направления.

Для оценки влияния добавок на магнитные и транспортные свойства образцов были измерены магнитополевые зависимости критического тока до 8 Тл и угловые зависимости критического тока в полях 1 и 3 Тл при 77 К. При низких температурах зависимости критического тока измерялись магнитными методами.

Было обнаружено, что лучшими токовыми характеристиками обладают ленты с 3% содержанием BSO, напыленные при пониженной скорости осаждения. Это увеличило критическую температуру и критический ток сверхпроводника, сохраняя улучшенную динамику поведения в магнитном поле.

ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНОГО ПОЛЯ ДЕФЕКТОВ НА ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВТСП

Мороз А.Н., Максимова А.Н., Кашурников В.А., Руднев И.А.

Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»

e-mail: moroz.anna@hotmail.com

При помощи метода математического моделирования на основе метода Монте-Карло в рамках модели слоистого ВТСП [1] проведены расчеты поведения магнитных и транспортных характеристик сверхпроводников второго рода в зависимости от внешнего магнитного поля и конфигурации дефектов.

Была сделана попытка определить зависимость критического тока Jc образца от величины внешнего магнитного поля в случае, когда распределение дефектов по образцу подчиняется экспоненциальному закону – плотность дефектов убывает по экспоненте от левого края образца к правому. Общее число дефектов равнялось 200, 500 и 600. В качестве образца был выбран сверхпроводник BSCCO [2] размером 5*5 нм. Вольтамперные характеристики снимались при различных величинах внешнего магнитного поля от -600 до 600 Эрстед.

Также вольтамперные характеристики были измерены для случаев, когда концентрация дефектов возрастает или спадает от краев образца к его середине по экспоненциальному закону. Были построены кривые Jc(H) для различных распределений одного и того же числа дефектов с целью их сравнения и поиска закономерностей. Полученные кривые обладают незначительной асимметрией, которая может быть объяснена неоднородностью поля дефектов, однако данное утверждение требует дальнейших исследований.

[1] В.А. Кашурников, И.А. Руднев, М.В. Зюбин, ЖЭТФ 121, 2002, вып. 2, с 442-452

[2] I. Pallecchi et al., Physica C 482, 2012, p 68-73

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ *IN-SITU* ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ МИКРОСТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ СПЛАВЕ Nb-Ti В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА

Овчаров А.В., Каратеев И.А., Гурьев В.В., Шавкин С.В., Круглов В.С., Васильев А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: ovcharov.91@gmail.com

Композиционные провода на основе сверхпроводящего сплава Nb-Ti широко используются для изготовления токонесущих элементов крупных магнитных систем, например, в проекте международного термоядерного реактора ИТЭР, ускорительной технике (LHC (Швейцария), Tevatron (США), HERA (Германия)), магнитных системах медицинских ЯМР-томографов и т.п. Востребованность обосновывает высокий интерес к оптимизации и улучшению структуры и свойств сверхпроводников. В настоящей работе методами электронной микроскопии исследовались изменения микроструктуры и морфологии тонких холоднокатаных лент на основе сверхпроводящего сплава Nb-50%вес.Ti, возникающие в ходе высокотемпературного отжига.

Образцы для ПЭМ были приготовлены с помощью фокусированного ионного пучка в сканирующем электронно-ионном микроскопе Helios DualBeam 600 (FEI, США). Подготовленные образцы исследовались в просвечивающем электронном микроскопе TITAN 80-300 (FEI, США) в режиме *in-situ* при отжиге в диапазоне от комнатной температуры до 800°C с шагом 50°C.

Применение ПРЭМ, в том числе высокого разрешения, позволило проследить динамику формирования наночастиц α-фазы титана в β-матрице (Рис 1-а). Активное выделение α-фазы Ti начинается при температуре 750°C. После охлаждения выделения не растворяются. В выделениях Ti обнаружена высокая концентрация структурных дефектов (Рис.1-б). Дефекты представляют собой включения кубической фазы Ti (пр.гр. Fm3m) в его гексагональной модификации.

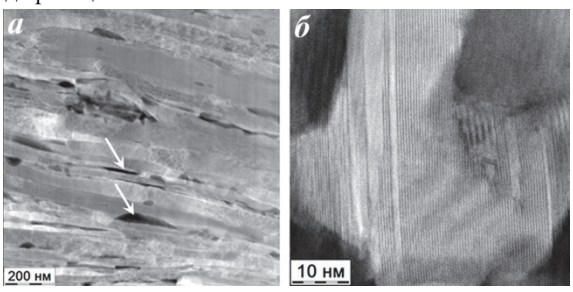


Рис. 1. а) ПРЭМ изображение поперечного среза ленты Nb-Ti во время отжига in-situ при 100°C (белыми стрелками обозначены включения Ti); б) Светлопольное ВР ПРЭМ изображение частицы α-фазы Ti с включениями кубической фазы.

УЛУЧШЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕРХПРОВОДНИКА НА ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Осипов М.А., Покровский С.В., Минеев Н.А., Абин Д.А., Руднев И.А.
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
e-mail: MAOsipov1@mephi.ru

В настоящее время основные усилия производителей направлены на получение длинных ВТСП лент с высокими транспортными характеристиками на постоянном токе. Однако, для повышения эффективности применения сверхпроводящих материалов в конкретных электротехнических и электроэнергетических приложениях требуется наличие высоких эксплуатационных характеристик на переменном токе, когда на первый план выходит значение энергетических потерь в токонесущем элементе. Одним из возможных методов уменьшения потерь на переменном токе является филаментирование ленты – разделение сверхпроводящего слоя на отдельные полоски – филаменты.

В данной работе было проведено исследование возможностей снижения потерь на переменном токе в ВТСП лентах фирмы СуперОкс шириной 4 мм. Филаментирование было проведено путем лазерной резки готовых лент с медным покрытием. Также для сравнения были проведены исследования исходных образцов и промышленных образов, филаментирование которых было проведено при помощи химического травления ВТСП слоя лент до покрытия их медью

Потери были получены из кривых намагничивания, измеренных на вибрационном магнитометре в диапазоне температур от 4К до 77К. При температуре 77К были проведены прямые транспортные измерения потерь в лентах. Наряду с потерями, были исследованы транспортные характеристики лент, исследовано влияние филаментации на величину критического тока.

Был проведен анализ полученных результатов и сравнение данных для разных типов образцов. Экспериментальные результаты сопоставлены с результатами теоретического расчета. Показана практическая возможность существенного уменьшения значения энергетических потерь за счет филаментирования лент.

УЛУЧШЕНИЕ МАГНИТНЫХ И ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВТСП ЛЕНТ С ПОМОЩЬЮ ПИКОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Покровский С.В.[1], Маврицкий О.Б.[1], Егоров А.Н.[1], Минеев Н.А.[1], Тимофеев А.А.[1], Волков М.П.[2], Руднев И.А.[1]

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

[2]*Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе РАН*

e-mail: sergeypokrovskii@gmail.com

Работа посвящена исследованию модификации тонкой пленки высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с помощью пикосекундного лазерного воздействия. Целью работы является создание упорядоченной решетки искусственных центров пиннинга и повышение магнитных и транспортных характеристик ВТСП лент второго поколения.

В литературе описаны ряд исследований по использованию лазерного воздействия для создания центров закрепления вихревой структуры сверхпроводника [1,2]. Разрабатываемая нами методика позволяет выполнить контролируемое изменение параметров промышленных ВТСП лент и локально улучшить характеристики материала.

Для исследования использовались промышленные ленты производства фирмы СуперОкс. Лазерное воздействие выполнялось с помощью установки ПИКО-3 НИЯУ МИФИ [3], длительность импульса 25 нс, длина волны 1064 нм. Энергия импульса варьировалась от 50 до 4000 нДж.

В образцах была создана локальная квадратная решетка дефектов с размерами ~1 μм с периодом 50 μм, исследована структура пленки в области искусственных дефектов. Обнаружены кольцевые зоны формирования модифицированной структуры. Исследованы магнитные и транспортные свойства образцов до и после воздействия в широком интервале магнитных полей и температур и показано положительное влияние лазерного воздействия на токонесщие характеристики ленты.

[1] Y. L. Wang, M. L. Latimer and et al// PHYSICAL REVIEW B, 2013, v.87, pp. 220501-1 220501-4

[2] Marco S. Welling, Rinke J. Wijngaarden and et al// Physica C, 2004, 404, pp. 410–414

[3] A.V. Nechaev, O.B. Mavritskii and et al// Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2006, vol. 70, no. 9, pp. 1498-1502

ОСОБЕННОСТИ ЗАЩИТНОГО И СТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО СЛОЕВ В ДЛИННОМЕРНЫХ ВТСП ЛЕНТАХ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ.

Ревазов В.В., Дегтяренко П.Н., Круглов В.С., Крылов В.Е., Морозов О.В., Свистунова О.И., Шавкин С.В.

НИЦ «Курчатовский Институт»

e-mail: Revazov@bk.ru

В рамках проекта «Сверхпроводниковая индустрия» в НИЦ «Курчатовский Институт» поставлен, смонтирован и запущен прототип экспериментальной пилотной линии по выпуску длинномерных ВТСП лент с длиной до 100 м на основе YBCO. Серебрение (металлизация) и гальваническое меднение лент являются завершающими этапами.

Металлизация осуществляется в вакуумной камере термическим осаждением материала. Серебро в виде навесок массами m_1 = 4,75 г, m_2 = 2,75 г, m_3 = 2,75 г, m_4 = 4,75 г загружается в испарители, чистота 99,99%. Для обеспечения сцепления серебра с лентой перед процессом лента очищается плазменным разрядом путем подачи кислорода на электрод из золота. Далее, под воздействием тока идет расплавление и распыление серебра.

Медь сохраняет работоспособность сверхпроводника в случае ослабления его токонесущей способности при тепловых или механических возмущениях. Покрытие наносится по принципу «от катушки к катушке». В качестве электролита используется раствор медного купороса $CuSO_4*5H_2O$ (концентрация 245 г/л) [1]. Лента во время процесса располагается на одинаковом расстоянии между медными анодами. Это повышает стабильность процесса.

Получены образцы лент с толщиной серебра 3,2 мкм (1,62 мкм на рабочей стороне и 1,58 мкм на обратной стороне), а в результате нанесения меди - с толщинами 15, 26, 27, 28 и 50 мкм. Качество меди оценивалось по параметру электрофизического показателя RRR путем измерения электросопротивления в комнатных и азотных (77 К) температурах. Для образцов показатели RRR составили 6,27; 6,53; 6,6; 6,98 и 7,6 единиц соответственно, что удовлетворяет номинальному интервалу значений (6-8).

[1] Floegel - Delor U, Rothfeld R, Goebel B, Riedel T, IEEE Trans. Appl. Supercond.Vol. 11(2001)2838

ВОЗМОЖНОСТИ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СЛОЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ДЛИННОМЕРНЫХ ВТСП ПРОВОДНИКОВ

Свистунова О.[1], Круглов В.[1], Рутт А.[2], Шнайдер Т.[2], Кирхгофа Л.[2], Хофакер Ф.[2], Хесслер А.[2], Дитрих Р.[2], Усоскин А.[2]

НИЦ «Курчатовский институт» *

*Bruker HTS GmbH, Германия***

svistunova@yandex.ru

Очевидно, что структура и параметры нанесения функциональных слоев играют ключевую роль для получения высоких критических характеристик ВТСП проводников. В кооперации с немецкой компанией Bruker HTS, на оборудовании лабораторно-экспериментальной пилотной линии по выпуску ВТСП, запущенной в Курчатовском комплексе НБИКС-технологий [1], были получены отрезки ВТСП-ленты $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) длиной 40-75 м на подложке из нержавеющей стали с буферным слоем YSZ, с помощью метода импульсного лазерного осаждения. Исследованы зависимости толщины ВТСП-покрытия от энергии импульса и скорости осаждения. Было показано, что результирующая зависимость критического тока от толщины может быть описана в рамках двухслойной модели, где плотность тока в ближайшем к подложке слое в 2 раза больше, чем в слое, находящийся на расстоянии большем чем характерная толщина d. Найдены оптимальные значения этих величин.

Отмеченные закономерности могут бать использованы для оптимизации технологических режимов при выпуске длинномерных ВТСП проводников.

[1] V. Pansyrny, S. Koloskov, A. Avdienko, V. Kruglov, O. Svistunova, V. Stoyakin, V. Kruglov, S. Shavkin, P. Degtyarenko, V. Revazov, R. Dietrich, B. Prause, K. Schlenga, U. Betz, A. Usoskin, Manufacturing of HTS coated conductors in Compact Pilot Line and their investigations, EUCAS, Lyon Sep. 6-11, 2015, Book of Abstract, 3A-WT-P-02.05.

Микросимпозиум 3. Структурные аспекты аддитивных технологий

ХИТОЗАН И ЕГО СОПОЛИМЕРЫ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ТКАНЕИНЖЕНЕРНЫХ МАТРИКСОВ

Бардакова К.Н., Баграташвили В.Н., Тимашев П.С.
[1]*Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: arie5@yandex.ru

Повышение качества жизни человека, а именно, интенсификация процессов регенерации травматических повреждений тканей и органов, а также снижение общего количества отторгаемых имплантов сделало актуальными задачи имплантологии и регенеративной медицины. Современные технологии трехмерной печати позволяют создавать полностью повторяющие существующий дефект персонализированные материалы (т.н. матриксы, скаффолды), использование которых при заместительной терапии вместе с аутологичными клетками и биоактивными компонентами позволит не только снизить негативные последствия имплантации, но и стимулировать репарационные процессы [1]. В работе методами одно- и двухфотонной лазерной стереолитографии [2,3], микромолдинга [4] по заданной компьютерной модели были сформированы структурированные гидрогели на основе синтезированных твердофазным способом привитых сополимеров хитозана. Для полученных матриксов изучены их свойства цитосовместимости, пролиферативная активность МСК человека, степень и характер активации экспрессии генов-маркеров дифференцировки, совместимость клеток нервной системы, биорезорбируемость in vivo. Для макроструктур разработаны схема модификации механических свойств матриксов, методы варьирования свойств набухания и смачиваемости матриксов.

[1] Тимашев П.С., Бардакова К.Н. и др. // Прикладная биохимия и микробиология, 2016, том 52, №5, с.1 – 9.

[2] Akopova T.A., Timashev P.S. et al. // Mendeleev Communications, 2015, том 25, № 4, с. 280-282.

[3] Тимашев П.С., Бардакова К.Н. и др. // Современные технологии в медицине, 2015, том 7, № 3, с. 20-31.

[4] Тимашев П.С., Бардакова К.Н. и др. // Известия Уфимского научного центра РАН, 2016, том 1, № 3, с. 129-133.

НЕВПЛАВНЫЕ ОМИЧЕСКИЕ КОНТАКТЫ ДЛЯ GaN HEMT НА ОСНОВЕ GaN С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ ПРИМЕСИ КРЕМНИЯ

Занавескин М.Л., Езубченко И.С., Майборода И.О., Грищенко Ю.В., Черных И.А., Андреев А.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: zanaveskin.maxim@gmail.com

Транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе нитридов галлия, алюминия и индия (GaN, AlN, InN) представляют собой наиболее перспективные компоненты для создания СВЧ МИС предварительных и оконечных усилителей мощности передающих модулей РЭА частотного диапазона от 4 до 18 ГГц. Разработка нитридных гетероструктур и HEMT на их основе является комплексной многофакторной задачей, которая не может быть решена эффективно без применения комплементарных исследовательских методик, необходимых для характеризации структурных, морфологических и электрофизических свойств создаваемых объектов.

Важным вопросом в формировании нитридных HEMT является изготовление омических контактов к двумерному электронному газу. Традиционная технология вжигания многослойных металлических стеков [1] обладает рядом недостатков: развитие границ контактов при термическом отжиге, неуниверсальность технологии, высокие удельные сопротивления контактов и др. Подход, основанный на формировании омических контактов путем селективного доращивания сильнолегированных слоев вырожденного полупроводника, лишен всех перечисленных недостатков [2,3].

В докладе будет сообщено о том, как различные методы морфологического и структурного анализа используются для разработки технологий формирования GaN HEMT с невплавными омическими контактами на основе селективно осаждаемых слоев GaN с высоким содержанием легирующией примеси кремния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 14.607.21.0116 от 14.10.2015, RFMEFI60715X0116).

[1] N Chaturvedi et al. // Semicond. Sci. Technol., 2006, 21, 175–179.

[2] Yuanzheng Yue et al. // IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, JULY 2012, Vol. 33, No. 7., 988-990

[3] Майборода И.О., Андреев А.А., и др. // ПЖТФ, 2014, том 40, выпуск 11, 2014, сс. 80-86.

САМООРГАНИЗАЦИЯ ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ ФТОРФУЛЛЕРЕНА $C_{60}F_{18}$ НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ Au(111) И Ni(100)

Лебедев А.М.[1], Меньшиков К.А.[1], Свечников Н.Ю.[1], Станкевич В.Г.[1], Суханов Л.П.,[1]. Чумаков Р.Г.[1], Бржезинская М.М.[2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Berlin, Germany

e-mail:lebedev.alex.m@gmail.com

Представлены результаты исследования самоорганизации полярных молекул фторида фуллерена $C_{60}F_{18}$ с высокими электрическими дипольными моментами (ЭДМ ~ 10 Д) на поверхности Ni(100) и Au(111) с помощью рентгеновской спектроскопии, сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП).

Эксперименты проводились на поверхностях с различной химической активностью и связаны с химической для золота и физической для никеля формами адсорбции молекул $C_{60}F_{18}$. В обоих случаях наблюдалось образование островковой пленки с молекулярным упорядочением внутри островков. На подложке Ni(100) мы впервые наблюдали трансформацию из осажденной диэлектрической непрерывной 2D тонкопленочной структуры в 3D-сборку островкового типа, оценили морфологию структуры и её изменение под влиянием рентгеновского излучения и температуры. На основе СТМ измерений [1] установлено, что острова, имеющие поперечный размер 10-100 нм, обладают плотноупакованной гексагональной структурой с межмолекулярным расстоянием 1,0 ± 0,1 нм (размер молекулы $C_{60}F_{18}$ равен 1 нм). В обоих случаях ЭДМ осажденных молекул $C_{60}F_{18}$ перпендикулярны поверхности, а атомы фтора направлены в сторону поверхности.

Проведено сравнение наших экспериментальных данных с теоретическими моделями, описывающими адсорбцию точечных диполей на металлической поверхности. Обсуждается влияние молекулярного диполь-дипольного, диполь-поверхностного и дисперсионного взаимодействий и поляризационных эффектов на процесс самоорганизации.

[1] Bairagi K, Bellec A, Chumakov RG, Menshikov KA, Lagoute J, Chacon C, et al. STM study of C60F18 high dipole moment molecules on Au(111). Surf. Sci. 2015; V.641, pp 248-251.

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЛС

Лукина Е.А., Филонова Е.В., Тренинков И.А., Сбитнева С.В.

ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ

e-mail: lukinaea@viam.ru

Применение аддитивных технологий для получения сложных конструкций с использованием селективного лазерного сплавления (СЛС) позволяет существенно снизить химическую и структурную неоднородность сплава, устранить эффект анизотропии физико-механических характеристик.

Методами ПЭМ и РЭМ изучено строение ячеистой структуры жаропрочного никелевого сплава системы легирования Ni-Al-W-Co-Nb-Cr-Ti-Mo, ее геометрические параметры, а также изменение фазового состава в зависимости от изменения энергетического воздействия лазера. Установлено, что границы ячеек представляют собой скопления дислокаций вокруг дисперсных выделений карбидов. Внутри ячеек наблюдается распад с образованием наноразмерной, не имеющей четкой огранки γ'-фазы. Также выявлена корреляция между количеством подведённой к материалу энергии, остротой кристаллографической текстуры и удельным количеством трещин в материале. С применением рентгеноспектрального микроанализа с локальностью 2 нм исследованы химические микронеоднородности в масштабе одной ячейки. Такого рода исследования позволили проанализировать флуктуации состава по основным γ'-образующим элементам в масштабе 200-300нм. Установлено, что закономерности микросегрегации легирующих элементов по сечению ячеек в сплаве, полученном по технологии СЛС подчиняются тем же законам, что и в никелевых сплавах, полученных методом равноосной направленной кристаллизации по сечению слитка.

Также исследован химический состав и установлена стехиометрия карбидных фаз, выявлены их морфологические особенности в зависимости от энергетического воздействия и термообработки.

ФОРМИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ В ПРОЦЕССЕ СЛС

Медведев П.Н., Филонова Е.В., Тренинков И.А., Зайцев Д.В.

[1]ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ

e-mail: pnmedv@gmail.com

В работе проведено исследование влияния технологических параметров селективного лазерного сплавления (СЛС) порошков и последующей термообработки на кристаллографическую текстуру жаропрочного никелевого сплава системы легирования Ni-Al-W-Co-Nb-Cr-Ti-Mo.

Стратегия штриховки лазера – островковая диагональная, а варьируемым технологическим параметром являлась скорость сканирования. Формируется кристаллографическая текстура подобная текстуре литья {100}. Помимо кристаллизации обнаружено протекание процессов рекристаллизации в процессе построения образца. Выявлено, что при увеличении скорости сканирования лазера наблюдается увеличение количества рекристаллизованных зерен, локализованных во фрагментах. При этом происходит рассеяние кристаллографической текстуры с увеличением доли высокоугловых границ. В качестве меры степени рекристаллизации предложено принять долю зерен, ориентировки которых отклонены более чем на 15° от <100> в высотном направлении. При отжиге процесс рекристаллизации усугубляется вплоть до формирования полностью равноосной структуры зерен. На малых скоростях сканирования рекристаллизация в первую очередь проходит по телу фрагментов, а их границы в меньшей степени затрагиваются этим процессом.

СТРУКТУРО- И ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В ПРОЦЕССАХ ТРЁХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ МЕЛКОДИСПЕРСНЫМИ ФОСФАТАМИ КАЛЬЦИЯ

Миронов А.В.[1], Комлев В.С.[2], Попов В.К.[1], Смирнов И.В.[2], Федотов А.Ю.[2]

[1]Институт Фотонных Технологий РАН (ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН)

[2]Институт металлургии и материаловедения имени А. А. Байкова РАН

scftlab@gmail.com

Представленная работа направлена на разработку комплексного решения задачи оперативного изготовления на основе трехмерных компьютерных моделей имплантируемых матричных структур (матриксов), обладающих выраженным остеогенным потенциалом для инженерии костных тканей. Предложен и успешно реализован процесс трёхмерной струйной печати реакционно-твердеющей системой, образующейся в результате взаимодействия мелкодисперсного (30-80 мкм) порошка трикальцийфосфата (ТКФ) и 2% водного раствора солей ортофосфорной кислоты. Для этой системы экспериментально установлены закономерности фазообразования, формирования керамических макро- и микроструктур, а также их физико-механических свойств в процессе реакционного связывания. На оригинальной установке трёхмерной струйной печати проведена оптимизация процесса послойного формирования керамических матриксов заданной архитектоники, позволившая достигнуть пространственного разрешения печати порядка 100 мкм и исследовать особенности процессов струйной трехмерной печати мелкодисперсных порошков ТКФ.

Для улучшения биологических свойств (в первую очередь, повышения остеогенного потенциала) изготавливаемых персонализированных матриксов разработан биомиметический способ модификации их поверхности и объема посредством направленного синтеза кальцийфосфатных фаз заданного состава и морфологии. Выявлены кинетические особенности формирования микроструктуры и фазового состава полученных материалов в биомиметических растворах, обеспечивающих фазовую трансформацию трикальцийфосфата в дикальцийфосфат дигидрат и октокальций фосфат.

Разработанные материалы и метод трехмерной струйной печати адаптированы для работы с исходными данными, получаемыми с помощью (компьютерных и ЯМР томографов. Анализ структуры, размеров и форм лабораторных партий образцов остеогенных керамических матриксов показал хорошее (в пределах 100 мкм) геометрическое соответствие их реальным биологическим прототипам и воспроизводимость микроструктуры и фазового состава образующего их материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 15-13-00108) и РФФИ (грант № 16-29-11722).

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ И НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В ФОТОПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ ЛАЗЕРНОЙ СТЕРЕОЛИТОГРАФИИ

Никитин А.Н.
ИПЛИТ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: anatoly_nikitin@mail.ru

Работа направлена на выявление особенностей нестационарных и неоднородных процессов, которые протекают в фотополимерной композиции (ФПК) при формировании трехмерного объекта в лазерной стереолитографии. Цель таких исследований – формулировка требований к ФПК для улучшения физико-химических свойств изделий, создаваемых по технологии лазерной стереолитографии.

Использованы два подхода при исследовании процессов в ФПК. В первом подходе основное внимание уделено особенностям неидеальной полимеризации из-за наличия в ФПК полифункциональных соединений. Разработаны PREDICI программы, которые позволяют исследовать как сополимеризацию в ФПК, используемых в ИПЛИТ РАН с добавлением различных наполнителей, так и полимеризацию в ФПК, состоящей из инициатора и полифункционального мономера. Показано, что рост макромолекулы в ФПК происходит путем образования полирадикалов. Исследовано как наличие этих полирадикалов, условий полимеризации и значений кинетических параметров полимеризации влияет на точку гелеобразования.

Во втором подходе основное внимание уделено особенностям нестационарных и неоднородных процессов, которые происходят в ФПК. Эти процессы обусловлены быстрым изменением концентраций компонентов ФПК, неоднородной локализацией лазерного излучения, конверсии мономера в полимер, выделения теплоты из-за полимеризации и т. д. Подготовлены программы на языке ФОРТРАН для исследования (со)полимеризации в ФПК. Рассчитаны границы отвержденной области в ФПК в зависимости от условий (со)полимеризации, временные динамики концентраций радикалов, мономера, ингибитора в различных областях пространства.

По результатам исследований сформулированы требования к ФПК для использования в лазерной стереолитографии. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-29-10272.

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКЕ

Хоменко М.Д., Мирзаде Ф.Х., Низьев В.Г.
Институт проблем лазерных и информационных технологий, филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,
e-mail:hmd@laser.ru

Самосогласованная численная модель, включающая теплопроводность, гидродинамику, перенос примеси и кинетику фазового перехода разработана для лазерной наплавки с коаксиальной инжекцией порошка. Свободный программный пакет вычислительной гидродинамики OpenFoam используется для численного исследования аддитивного процесса. Программа C-CLSVOF [1] адаптирована для численного моделирования тепло-массопереноса, и движения свободной поверхности ванны расплава. Популяционное уравнение Колмогорова (PKJMA) [2] используется для моделирования фазового перехода в условиях неравномерного распределения температуры на подложке [3]. Расчеты проведены на супер компьютерном кластере ИПЛИТ РАН. Проведено исследование параллельной масштабируемости использованной программы. Микроструктура наплавленного слоя исследуется с точки зрения зависимости от параметров процесса. Показано влияние самосогласованнх процессов теплопроводности гидродинамического переноса тепла и примеси, а так же кинетики фазового перехода. Результаты могут быть использованы для создания карты процесса наплавки.

Ключевые слова: лазерная наплавка, численное моделирование, кинетика фазового перехода, OpenFoam, микроструктура.

[1] Albadawi A., Donoghue D.B., Robinson A.J., Murray D.B., and Delauré Y.M.C., «Influence of surface tension implementation in Volume of Fluid and coupled Volume of Fluid with Level Set methods for bubble growth and detachment,» // International Journal of Multiphase Flow , Vol. 53, 2013. pp. 11–28.

[2] Crespo D., Pradell T., «Evaluation of time-dependent grain-size populations for nucleation and growth kinetics,» // Physical Review B, Vol. 54, No. 5, 1996. pp. 3101-3109.

[3] Khomenko M.D., Panchenko V.Y., Niziev V.G., Mirzade F.K., and Grishaev F.K., // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics, Vol. 80, No. 4, 2016. pp. 381–386.

ИЗГОТОВЛЕНИЕ СКАФФОЛДОВ ПОВЕРХНОСТНО СЕЛЕКТИВНЫМЛАЗЕРНЫМ СПЕКАНИЕМ ТЕРМОСТАБИЛЬНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОДЫ КАК СЕНСАБИЛИЗАТОРА НАГРЕВА

Чурбанов С.Н., Тимашев П.С., Антонов Е.Н., Попов В.К., Баграташвили В.Н.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

e-mail: churbanov.semyon@gmail.ru

Селективное лазерное спекание (СЛС) весьма эффективно при создании трехмерных структур заданной топологии в рамках быстро развивающегося направления современной промышленности и науки, получившего название «аддитивные технологии». В основе метода СЛС лежит спекание частиц материала в результате их лазерного нагрева и плавления. Управляемое движение лазерного пучка позволяет послойно по компьютерной модели получать изделия заданной топологии из мелко-дисперсных порошковых материалов

Одно из перспективных применений метода СЛС – создание трехмерных биосовместимых структур для различных биомедицинских применений, в частности в имплантологии и тканевой инженерии. Развитием метода СЛС с целью его использования при создании биодеградируемых полимерных матриц-носителей, необходимых для тканевой инженерии, является разработанный нами метод поверхностно-селективного лазерного спекания (ПСЛС). Он основан на спекании полимерных частиц размером 50 – 200 мкм лазерным излучением ближнего

ИК диапазона (для которого полимеры являются практически прозрачными) за счет поглощения излучения частицами сенсибилизатора (вода), добавленными в полимерный порошок в небольшом количестве (массовая концентрация не более 0.1 %). При этом происходят сенсибилизированный нагрев лишь приповерхностной зоны полимерных частиц, на которых располагаются частицы поглотителя (сенсибилизатора), и их взаимная интеграция (спекание).

В настоящей работе предложен и исследован новый вариант метода ПСЛС, в котором в качестве сенсибилизатора нагрева при спекании термолабильных полимерных частиц используется жидкая вода, а эффективный нагрев ее осуществляется излучением тулиевого волоконного лазера на длине волны 1.94 мкм, особенно перспективного для применений в области лазерной медицины. При использовании такого лазера возможность применения воды в качестве эффективного сенсибилизатора нагрева полимера в методе ПСЛС связана с наличием у нее сильной полосы поглощения в области 1.94 мкм с показателем поглощения ~130 $см^{-1}$.

СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЕ УШИРЕНИЕ ИНФРАКРАСНЫХ И РАМАНОВСКИХ ЛИНИЙ CO_2 АРГОНОМ: ТЕСТ КЛАССИЧЕСКОЙ УДАРНОЙ ТЕОРИИ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ НА ЭТАЛОННОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Иванов С.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: serg.ivanov.home@mail.ru

Классический подход впервые применен для расчета коэффициентов уширения давлением колебательно-вращательных линий поглощения газообразного CO_2 в смеси с Ar. Исследованы три типа спектров CO_2 - ИК поглощение, изотропное и анизотропное рамановское рассеяние. Формулы классической ударной теории Гордона [1] применены наряду с точными уравнениями Гамильтона для динамики столкновений пары CO_2–Ar. Расчеты базируются на наиболее точной неэмпирической поверхности потенциальной энергии (ППЭ) CO_2–Ar Хатсона с соавт. [2]. Получены зависимости полуширин линий поглощения CO_2 от вращательного квантового числа $J \leq 100$ в диапазоне температур 77–765 K. Выполнено сравнение с экспериментальными данными и результатами полностью квантовых CC/CS расчетов с использованием идентичной ППЭ. Для ИК спектров проведено также сравнение с результатами популярной полуклассической методики Робера-Бонами (RB) [3]. Показано, что эта методика дает плохие результаты, в то время как классические расчеты отлично совпадают как с экспериментом, так и с квантовыми расчетами при всех температурах. Классическая ударная теория в ее настоящем варианте способна выдавать быстро и точно коэффициенты уширения спектральных линий линейных молекул для любого значения J с использованием полноразмерных неэмпирических ППЭ, включая случаи, когда другие расчетные методы оказываются либо чрезвычайно затратными (квантовые методы CC/CS), либо дают ошибочные результаты (полуклассические методы типа RB).

[1] Gordon R.G. // J. Chem. Phys., 1966, v. 44, p. 3083–3089.

[2] Hutson J.M., Ernesti A., Law M.M. et al. // J. Chem. Phys., 1996, v. 105, p. 9130–9140.

[3] Robert D., Bonamy J. // J. Phys. (Paris), 1979, v. 10, p. 923–943.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ НЕРЖАВЕЮЩИХ СТАЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПРИМЕНЕНИЕМ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Старицын М.В., Кузнецов П.А., Петров С.Н.
ФГУП «ЦНИИ «КМ Прометей»
e-mail: mail@crism.ru

Актуальность и перспективность аддитивных технологий определяются возможностью изготовления готового изделия с заданными свойствами за один цикл.

В настоящей работе исследуются структура образцов, изготовленных из порошков нержавеющих сталей методом селективного лазерного сплавления (СЛС) при различных мощностях и скоростях лазера.

В качестве исходных материалов использовались порошки мартенситно-стареющей и аустенитной сталей – Х16Н4Д4Б и 12Х18Н9Т соответственно, производства компании ОАО «Полема», с размером частиц не более 50 мкм, а также порошки аустенитной и мартенситной сталей марок 316 и 410L соответственно, производства компании «Höganäs» (Швеция), с размером частиц 20-53 мкм. Образцы были построены с помощью установки EOSint M270 в защитной атмосфере азота при мощностях лазера 175, 185 и 190 Вт и скоростях сканирования 600, 700 и 800 мм/сек.

Исследование структуры полученных образцов производилось методом дифракции отраженных электронов (EBSD). На рисунке 1 представлены характерные кристаллографические карты двух образцов нержавеющих сталей в исходном состоянии сразу после «выращивания». Видно, что в структуре образца присутствуют области каплевидной формы, прослеживается периодичность, а размер отдельных кристаллитов может достигать 400 мкм, что существенно больше размеров частиц порошка.

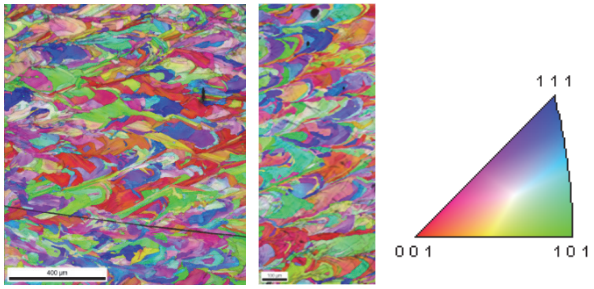


Рис. 1. EBSD-карта образцов нержавеющей стали марок 316L (слева) и 410L (справа), выращенных методом СЛС.

Можно сделать вывод, что микрокристаллическая структура образцов, полученных методом селективного лазерного сплавления, зависит от технологических условий их изготовления.

В работе представлен детальный анализ особенностей структуры образцов сталей и ее изменение при последующих термических обработках.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда по направлению «Проведение фундаментальных и поисковых исследований по приоритетным тематическим направлениям исследований» (проект № 15-19-00210)

Микросимпозиум 4. Керамика, композиционные и гибридные материалы

ОСОБЕННОСТИ ГИДРОЛИЗА ПОЛИЛАКТОГЛИКОЛИДНЫХ МАТРИКСОВ, СОДЕРЖАЩИХ РАЗЛИЧНЫЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЕ ПРЕПАРАТЫ.

Антонов Е.Н., Дунаев А.Г., Минаева С.А., Кротова Л.И., Попов В.К.

Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Скорость биодеградации полимерных матриксов-носителей фармацевтических препаратов (ФП) является одним из ключевых параметров при выборе материалов, используемых для формирования лекарственных систем пролонгированного действия. ФП, инкапсулированные в матриксы на основе алифатических полиэфиров, могут оказывать существенное влияние на скорость деградации последних в процессах их гидролиза в организме реципиента.

Целью настоящей работы являлось исследование влияния метилурацила, ацетилсалициловой кислоты, ибупрофена и хондроитин сульфата в количестве до 20 масс.%, импрегнированных с помощью сверхкритического диоксида углерода в матриксы, состоящие из полилактогликолидов (сополимеры молочной и гликолевой кислот), на скорость деградации полимерных структур в растворе фосфатно-солевого буфера. Продолжительность нахождения образцов в растворе составляла от одной до шести недель.

На основе анализа изменений молекулярной и гравитационной масс полимеров, проведенного методами ГПХ и микрогравиметрии, определены константы скоростей деградации полимеров, импрегнированных определенными ФП. Обнаружено, что для матриксов, содержащих аспирин и ибупрофен, молекулярные массы полимеров уже через 1 неделю наблюдений уменьшились в 3-4 раза по сравнению с их исходными значениями. В то же время для матриксов с метилурацилом и хондроитин сульфатом эти изменения не превышали 10 – 20 %. Выявлены роли автокаталитического гидролиза и гетерогенной эрозии полимерной поверхности, и определен их вклад в процесс деградации матриксов в каждом конкретном случае.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-25-00055, в части разработки методов формированию матриксов) и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 16-29-07356, в части анализа процессов деградации полимеров).

ПРИМЕНЕНИЕ ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ И РЕНТГЕНОВСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ

Анциферова А.А.[1,2], Кашкаров П.К.[1,2,3], Ковальчук М.В.[1,2,4]

[1]НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

[3] Московский физико-технический институт (государственный университет)

[4] Санкт-Петербургский государственный университет

e-mail: antsiferova_aa@nrcki.ru

Развитие нанотехнологий и появление значительного количества продукции наноиндустрии на рынке бытовых товаров в конце первого десятилетия XXI в. привнесли новый смысл в проблему нанобезопасности [1], ранее носившей лишь гипотетический характер, «оживили» и «приземлили» изыскания ученых-фантастов. Как показывают современные токсикологические исследования, проводимые, обычно, in vitro, наночастицы способны причинить существенный вред живой клетке, выражающийся в нарушении метаболизма, генетических изменениях, апоптозе и некрозе [2]. Другим не менее важным направлением исследования в области нанобезопасности является детектирование нанообъектов в различных средах и оценка их биокинетических параметров.

В связи с этим, данная работа посвящена рассмотрению двух сопоставимых по масштабности методик: ядерно-физических методов и рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения.

В работе проводится сравнительная характеристика этих двух методов и предлагается способ оптимизации выбора применения каждого из этих двух подходов в индивидуальном случае. Кроме того, представлены экспериментальные данные по биокинетике наночастиц серебра и двуокиси титана, полученные на основе нейтронно-активационного и рентгенофлуоресцентного анализов.

[1] Ковальчук М. Идеология нанотехнологий – Москва: ИКЦ «Академкнига», 2011, 222 с.

[2] Carlson C., Hussain S., et al. Unique cellular interaction of silver nanoparticles: size-dependent generation of reactive oxygen species // J Phys Chem B, 2008, V.112, N.43, pp.13608-13619.

НОВЫЕ БИОДЕГРАДИРУЕМЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ЛАЗЕРНЫХ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Баграташвили В.Н., Тимашев П.С.
[1]Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: timashev.peter@gmail.com

Одним из стратегических направлений современного биомедицинского материаловедения является создание материалов и структур на основе биостабильных и биорезорбируемых полимеров с заданной архитектоникой. Круг применений таких структур очень широк, начиная от эндопротезирования (имплантологии), где на основе высокомолекулярных биостабильных полимеров создаются вкладыши для искусственных суставов, до регенеративной медицины и тканевой инженерии, когда для восстановления твердых тканей используются 3-х мерные матриксы на основе биорезорбируемых полимеров. К этим структурам предъявляются особые требования как по составу, биологической активности, присутствию следов токсичных соединений, так и по архитектонике, которая должна имитировать заменяемые ткани или органы, т.е. иметь определенную пористость структуры, механическую прочность и т.д. Возможность постепенной деградации материала в процессе использования структуры *in vivo* обеспечивает протекание процесса роста (регенерации) ткани, тогда как в случае использования биологически стабильного материала он будет оставаться в организме и может стать причиной инициирования протекания воспалительных процессов. В представленном докладе будут рассмотрены новые подходы к формированию биодеградируемых функциональных структур на основе синтезированных полимеров и олигомеров, а также представлены результаты их биологического тестирования in vitro и in vivo, в том числе с использованием человеческих стволовых клеток.

СТРУКТУРНЫЕ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ И ПЛЕНОК ОРГАНИЧЕСКОГО СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА 2-МЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА

Балашова Е.В., Кричевцов Б.Б., Свинарев Ф.Б., Зайцева Н.В.
ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе» РАН
e-mail: balashova@mail.ioffe.ru

В 2012 году были обнаружены сегнетоэлектрические и антисегнетоэлектрические свойства в органических и гибридных кристаллах на основе бензимидазола [1]. В частности, в кристаллах 2-метилбензимидазола $C_8N_2H_8$ (MBI) наблюдались петли диэлектрического гистерезиса при комнатной температуре. В 2015 году методом «соскабливания раствора» (solution shearing) были получены первые пленки MBI в виде планарных периодических структур [2]. Целью настоящей работы являлось выращивание пленок MBI методом испарения и исследование их структурных и диэлектрических свойств. Как показали предыдущие исследования, этот метод весьма оказался эффективным для получения пленок аминокислотных сегнетоэлектриков [3,4]. Рентгенодифракционные исследования показали, что пленки MBI могут обладать одним из двух вариантов текстуры: расщепленные кристаллы, состоящие из иглообразных кристаллитов, растущих вдоль псевдотетрагональной оси (рис.1a), лежащей в плоскости пленки, или же блоки, псевдотетрагональная ось в которых ориентирована перпендикулярно плоскости пленки. В полученных методом испарения структурах наблюдаются петли диэлектрического гистерезиса (рис.1b). Исследуются температурные и частотные зависимости диэлектрической проницаемости, диэлектрических потерь, остаточной поляризация и коэрцитивного поля.

a) b)

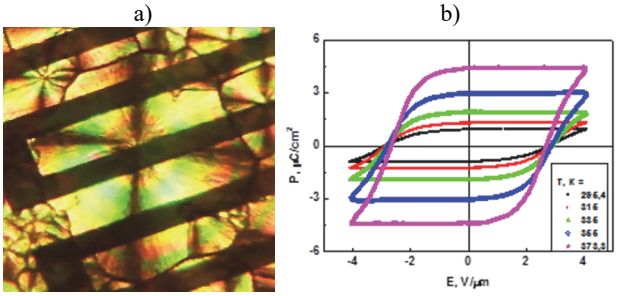


рис.1(a) Фотография пленки MBI в поляризационном микроскопе в скрещенных поляризаторах; b) Петли гистерезиса в пленках MBI на частоте 60 Гц при различных температурах.

[1] Horiuchi S., et al. // Nature Communications, 2012, V. 3, p. 1308.

[2] Noda Y., et al. // Adv. Mater., 2015, V. 27, p. 6475–6481.

[3] Balashova E.V., Krichevtsov B.B., Lemanov V.V. // J. Appl. Phys. 2008, V. 104, p 126104.

[4] Balashova E.V., Krichevtsov B.B. // Ferroelectrics. 2014, V. 469, p. 26–42.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СВЯЗЕЙ АМОРФНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУР И ПЕРЕХОДНЫХ СЛОЕВ

Белов И.В.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: ivanbelov1977@gmail.com

Компьютерный алгоритм моделирования атомной структуры методом переключения связей (bondswitching) был предложен в [1]. Основа этого метода – метод Монте Карло с шагом, состоящим из поворота связи 52 (см. Рис. 1), и небольшого изменения положений 1,3,4,7,6,8 атомов, чтобы при этом две связи 12 и 56 исчезли, а две другие 15 и 26 образовались.

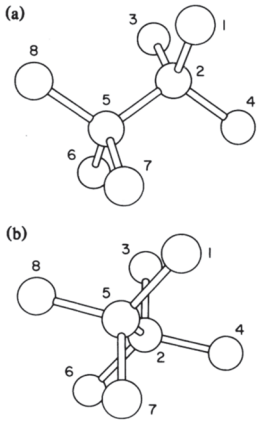


Рис.1. Расположение связей (a) в кристаллической кубической структуре. (b) в новой структуре после переключения связей между атомами.

Каждый шаг рассматриваемого случайного процесса (переключения связей, диффузии, химических реакций) происходит с вероятностью $\exp(-\Delta E/kT)$ при $\Delta E>0$ и 1 при $\Delta E<0$, где ΔE – это разница энергии начальной и конечной структуры в локальных минимумах, где T - температура процессов (переключения связей, диффузии и т.д), параметр моделирования. Если для $T < T_m$ аморфная фаза при моделировании превращается в кристаллическую, в то время как для $T>T_m$ наблюдается обратное, то при моделировании $T=T_m$ система в конечном счёте, через большое количество шагов придет к канонически равновесной структуре.

Предложен, разработан и апробирован алгоритм переключения связей в многокомпонентной системе. С помощью данного метода были смоделированы структуры аморфного кремния и аморфного SiO_2, которые показали хорошее совпадение радиальной функции распределения атомов с экспериментальными данными. Добавление в алгоритм процесса диффузия кислорода из связи в связь позволило смоделировать структуры между кристаллическим Si и аморфным SiO_2, а также между кристаллическим SiC и аморфным SiO_2. Изучение плотности энергии взаимодействия в структурах между данными материалами показало, что смоделированные структуры с точки зрения энергии взаимодействия более выгодны, чем начальные.

[1] F. Wooten, K. Winer, and D. Weaire, Phys. Rev. Lett. 54, 1392 (1985).

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО РАЗМОЛА НА ПРЕВРАЩЕНИЯ И СТРУКТУРУ ФУЛЛЕРЕНОВ C_{60} И C_{70} ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Борисова П.А.[1], Блантер М.С.[2], Бражкин В.В.[3],
Филоненко В.П.[3], Соменков А.В.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Московский технологический университет (МИРЭА)
[3]ИФВД РАНe-mail: borisovapa@mail.ru

Превращения в кристаллическом фуллерене C_{60} исследованы достаточно полно, в кристаллическом фуллерене C_{70} – менее подробно. Превращения в аморфном C_{60} представлены только в работе [1], а в аморфном фуллерене C_{70} такие работы практически отсутствуют.

Механический размол фуллеренов C_{60} и C_{70} приводит к образованию аморфной структуры. Ранее, нами были исследованы превращения в аморфной фазе фуллерена C_{60} в широком диапазоне температур (до 1500 °C) и давлений (до 8 ГПа). Было показано, что при термобарическом воздействии система фазовых превращений в аморфном C_{60} существенно отличается от превращений в кристаллическом фуллерене: не наблюдаются полимеризованные кристаллические фазы и образование аморфного и кристаллического графита происходит при более низких температурах. Также не наблюдается кристаллизация аморфного фуллерена.

В настоящей работе исследованы фазовые превращения в аморфном фуллерене C_{70} при высоких температурах (200-1300 °C) и высоких давлениях (2-8 ГПа). Показано, что превращения аморфного фуллерена C_{70} подобны превращениям аморфного C_{60} [1]: с повышением температуры он сначала переходит в аморфный графит, а потом – в кристаллический графит и в нем также не образуются полимеризованные фазы. Сравнение с диаграммой превращения кристаллического C_{70} [2] показывает, что механический размол существенно снижает устойчивость фуллерена C_{70} к превращению в равновесную фазу – графит.

Работа выполнена с использованием научного оборудования «Исследовательский реактор ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт». Авторы благодарят за частичную материальную поддержку настоящего исследования: М.С.Блантер, П.А.Борисова и В.А.Соменков - РФФИ (проект № 16-02-00193а), В.В.Бражкин - РНФ (проект № 14-22-00093) и П.А.Борисова и В.А.Соменков - РНФ (проект № 16-12-10065).

[1] Borisova P.A., Blanter M.S., Brazhkin V.V., Somenkov V.A., Filonenko V.P. // J. Phys. Chem. Solids, 2015, Vol. 83, P. 104–108.

[2] Milyavskiy V.V.,Borodina T.I.,Sokolov S.N.,Zhuk A.S.//Diamond& Related Materials,2005,Vol.14.P.1924-1927.

ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ CRG-PVA-TIO2 В КАЧЕСТВЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ. ПОЛУЧЕНИЕ, СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ.

Бадранова Г.У., Готовцев П.М., Дьяков А.В., Шаталова А.Ю.
НИЦ Курчатовский институт,
E-mail: gotovtsevpm@gmail.com

Фотокатализ является одним из перспективных методов очистки от органических загрязнителей благодаря использованию диоксида титана TiO_2, обладающего высокой фотокаталитической активностью, низкой стоимостью и нетоксичностью [1]. Однако ограничивающим фактором для практического применения TiO_2 является разделение наночастиц из реакционной среды, так как это сложный и дорогостоящий процесс. Наиболее эффективным методом решения этой проблемы на сегодняшний день является иммобилизация наночастиц TiO_2 на различных видах подложек (например, стекло, нержавеющая сталь, глина) [2]. Нам представляется интересным использование полимерных гидрогелей в качестве подложек благодаря таким свойствам, как механическая прочность, наличие уникальной пористой структуры, способность к набуханию в водных растворах, высокая проницаемость для различных соединений [3].

В данной работе представлены результаты исследования фотокаталитической активности гидрогеля, полученного на основе йота-каррагинана (i-CRG) и поливинилового спирта (PVA) путем физического сшивания с иммобилизованными наночастицами TiO_2. На основе проведенных исследований установлено, что гидрогели имеют высокую набухаемость и стабильность в водных растворах. На рисунке 1 представлены дифракционные графики CRG-PVA и CRG-PVA-TiO_2 набухших и высушенных образцов гелей

Проведенные опыты показали, что полученные композиты CRG-PVA-TiO_2 разрушают органические соединения в воде при облучении светом с длинной волны 400 нм. При этом в течении 10 часов, удается добиться разрушения более 80% органических соединений, что позволяет в перспективе использовать полученные результаты при создании фотокаталитических систем очистки воды.

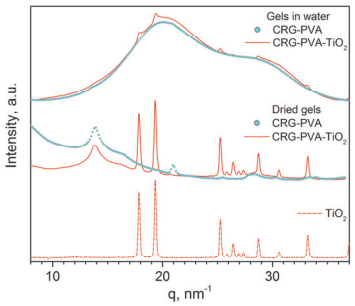


Рис. 1 Дифракционные графики CRG-PVA и CRG-PVA-TiO_2 набухших и высушенных образцов гелей, а также наночастиц TiO_2 (станция «ДИКСИ», НИЦ «Курчатовский институт»).

[1] J. Jing, et al., J Colloid Interf Sci, 2015, p. 90-94.

[2] S. Matsuzawa., et al., Appl Catal B-Environ, 2008, p. 39-45.

[3] P. Lei, et al., J Hazard Mater, 2012, p. 185-194.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР ТВЕРДЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ/ЭЛЕКТРОД

Иванов-Шиц А.К.[1], Галин М.З.[2], Мазо Г.Н.[3], Закалюкин Р.М.[1], Илюшин Г.Д.[1]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] Институт проблем химической физики РАН
[3] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет
e-mail: ivanov@crys.ras.ru

В настоящее время развивается идея о возможности управления ионной проводимостью с помощью подбора нужной «геометрии» гетероструктур. В [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**] было показано, что тонкопленочная гетероструктура $BaF_2|CaF_2$ имеет существенно более высокую проводимость. Для систем с кислород-ионным переносом $Ce_{1-x}Gd_xO_{2-\delta}$(GDC)|ZrO_2 [2] и $ZrO_2(Y_2O_3)$(YSZ)|$SrTiO_3$ [3] также наблюдалось возрастание проводимости.

Данная работа представляет результаты компьютерного моделирования (метод молекулярной динамики) структурных и транспортных характеристик границ гетеросистем GDC|YSZ и GDC|ScSZ. Выбор твердых растворов на основе оксидов циркония и церия определялся тем, что указанные материалы применяются в реальных ТОТЭ.

Результаты расчетов свидетельствуют, что основные структурные искажения происходят в тонком приграничном слое, непосредственно около геометрической границы GDC|Y(Sc)SZ. Поэтому в расчетном боксе был выделен этот граничный слой и два исходных слоя – GDC и YSZ (или ScSZ). Для этих слоев были определены «послойные» коэффициенты диффузии кислорода, а их температурные зависимости показаны на рис. 1.

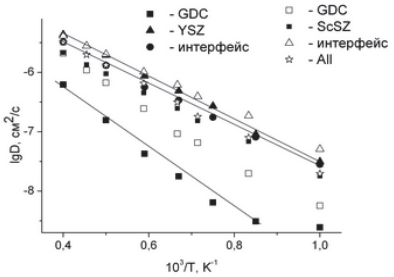


Рис.1. Температурные зависимости кислород-ионной проводимости изученных гетеросистем.

Таким образом, результаты компьютерного моделирования свидетельствуют о возможности конструирования реалистической атомистической модели для гетероструктур GDC|Y(Sc)SZ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 14-03-01051).

[1] Sata N., Eberman K., et al. // Nature, 2000, v.408. p.946.

[2] Azad S., Marina O. A., ., et al. // Appl. Phys. Letters, 2005, v.86, p.131906.

[3] Garcia-Barriocanal J., Rivera-Calzada A., et al. // Science, 2008, v.321, p.676.

СТРУКТУРА ГРАДИЕНТНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ НАНОМЕТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ФЕРРИТОВ

Кириченко В.Г., Коваленко О.В.
Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина
e-mail: val_kir48@mail.ru

Для создания устройств с высокой плотностью записи информации широко используют пленки феррит-гранатов (ФГ) на подложках галлий-гадолиниевого граната (ГГГ). Целью работы являлось исследование элементного состава переходных слоев с градиентом концентрации компонент в пленках железо-иттриевого граната (ЖИГ) на подложках ГГГ и диффузионных характеристик при осаждении пленок,

Пленки ферритов получали двумя способами: методом ионно-лучевого распыления мишени, обогащенной до 25% изотопом ^{57}Fe и методом импульсного лазерного осаждения на подложки ГГГ ориентации (111). Для определения элементного состава использовали спектрометрию резерфордовского обратного рассеяния, для анализа фазового состава использовали мессбауровскую спектроскопию.

Для определения диапазонов толщин стационарного роста пленок были построены производные функции концентрации компонент по глубине слоя, пример такого построения приведен на рис. 1. Эти данные свидетельствуют о значительных градиентах концентрации элементов по глубине слоя.

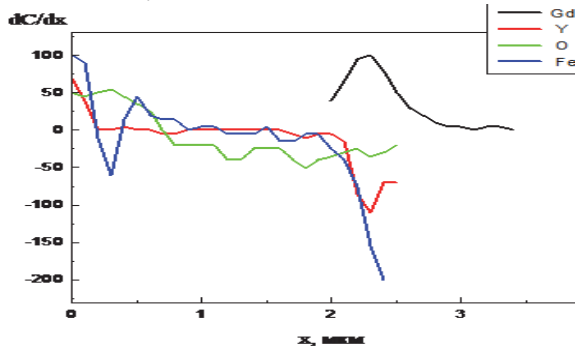


Рис.1. Производные функции концентрации компонент по глубине слоя пленки ЖИГ.

Концентрация кислорода понижена в верхнем поверхностном слое, глубиной до 0,5 мкм. Практически во всех случаях в верхних поверхностных слоях понижена концентрация железа и иттрия. Концентрация компонент стабилизируется в диапазоне толщин 0,5-2,0 мкм. На границе с подложкой концентрация кислорода, железа и иттрия уменьшается.

Полученные в работе значения коэффициентов диффузии кислорода значительно меньше приведенных литературных данных для массивных поликристаллических образцов. Возможно это объясняется незначительной ролью диффузии по коротким путям в случае монокристаллических тонких пленок ЖИГ.

Коэффициенты диффузии для металлических компонент лежат в диапазоне от 0,01 до 0,1• 10^{-12}см^2/с.

САМООРГАНИЗУЮЩИЕСЯ КОМПОЗИТНЫЕ ПОЛИМЕР-НАНОАЛМАЗНЫЕ ПОКРЫТИЯ ВАКУУМНЫХ КАТОДОВ

Лебедев-Степанов П.В.[1,2], Дидейкин А.Т.[3], Чвалун С.Н., Васильев А.Л.[1,4], Григорьев Т.Е[4]., Коровин А.С[4]., Белоусов С.И[4]., Молчанов С.П[1]., Юрасик Г.А[1]., Вуль А.Я.[3]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,*
[2] *НИЯУ МИФИ*
[3] *Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе*
[4] *НИЦ Курчатовский институт*
email: petrls@mail.ru

Впервые исследованы принципы формирования тонкопленочных нанокомпозитов «детонационный наноалмаз (ДНА) – полимер», перспективных материалов для высокоэкономичных автоэлектронных вакуумных катодов. Нанокристаллы ДНА размером 4 нм обеспечивают высокие электрофизические свойства (малую работу выхода электронов, стабильность и плотность эмиссионного тока), полимерная матрица – адгезию, прочность покрытия и дезагрегированность кристаллитов ДНА, наносимых из раствора, необходимую для стабильности и воспроизводимости свойств покрытия. Покрытия наносились на подложки с атомным упорядочением (Ni, Si) в процессах самосборки в испаряющемся водном растворе на основе технологии центрифугирования (spin-coating) [1].

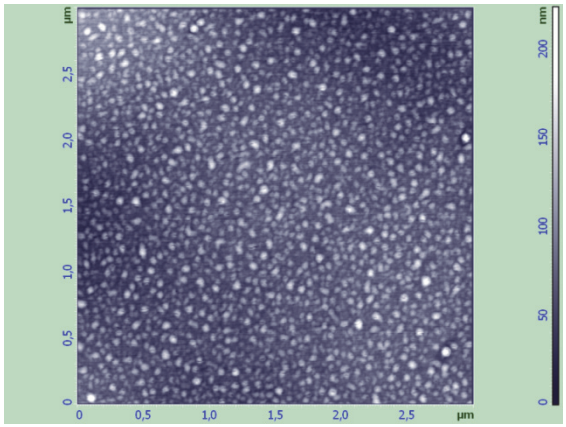


Рис.1.Нанокомпозитная пленка ДНА-сульфированный полианилин на подложке Ni.

Исследования полевой электронной эмиссии показали, что величина наблюдаемого порогового напряжения превышает типичные значения для наноуглеродных структур более, чем на порядок и в то же время она примерно на порядок меньше работы выхода из макроскопического алмаза или графита. ДНА обладает большей механической прочностью и меньшим выгоранием, что дает возможность получить большие плотности тока, чем при использовании других наноуглеродных эмиссионных центров. Установлено улучшение качества эмиссионных свойств покрытия в присутствии полимеров (рис. 1) по сравнению с нанесением пленок из раствора кристаллитов ДНА без полимеров.

[1] П.В. Лебедев-Степанов, С.П. Молчанов, А.Л. Васильев, В.П. Митрохин, Г.А. Юрасик, А.Е. Алексенский, А.Т. Дидейкин // ЖТФ, 2016, №3, сс. 83-90.

УЛУЧШЕНИЕ СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОМПОЗИТОВ ПУТЕМ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ НАПОЛНИТЕЛЯ

Матвейчикова П.В.[1,2], Васина Е.С.[2], Шилова О.А.[1], Хамова Т.В.[1], Дьяченко С.В.[2], Жерновой А.И.[2], Сычев М.М.[1,2]

[1] Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН

[2] Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

e-mail: matveychikovapolina@gmail.com

Функциональные композиционные материалы на основе матрицы цианэтилового эфира поливинилового спирта (ЦЭПС) и сегнетоэлектрического наполнителя $BaTiO_3$ являются перспективными материалами для защитных слоев в электронных устройствах. Важнейшим параметром, влияющим на целевые свойства таких материалов, является характер распределения наполнителя в матрице. В данной работе рассмотрен подход к повышению диэлектрической проницаемости за счет создания магнитной оболочки на поверхности наполнителя и влияния на структуру композита с помощью внешнего магнитного поля. Задачами данной работы являлись создание золь-гель методом структуры наполнителя «$BaTiO_3$(ядро)/$CoFe_2O_4$-SiO_2(оболочка)» и использование полученного порошка для изготовления композитов в матрице ЦЭПС. Сушку композиционного слоя проводили в магнитном поле ферритовых магнитов, расположенных параллельно и перпендикулярно плоскости образца. В работе рассмотрены структурные и магнитные свойства наполнителя, а также влияние внешнего магнитного поля на целевые свойства композитов. Установлено, что данный подход позволяет повысить диэлектрическую проницаемость ε образцов при этом потери (tgδ) остаются минимальными.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (соглашение 14.574.21.0002, уникальный идентификатор RFMEFI57414X0002) и программы ОХНМ РАН №7.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИСТЕМАХ MO_2-Ln_2O_3 (*M*=Zr, Hf; *Ln*=La, Gd, Y)

Менушенков А.П.[1], Попов В.В.[1], Ястребцев А.А.[1], Зубавичус Я.В.[2], Щетинин И.В.[3], Царенко Н.А.[4]

[1] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

[3] Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

[4] АО «Ведущий научно-исследовательский институт химической технологии

e-mail: apmenushenkov@mephi.ru

С помощью комбинации методов рентгеновской дифракции (обычной и аномальной), локально-чувствительной рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS), анализа атомной парной функции распределения (PDF) и спектроскопии комбинационного рассеяния, позволяющей контролировать изменения как катионной, так и анионной подрешеток, изучены особенности образования и перестройки кристаллической и локальной атомной структуры в ходе кристаллизации и фазовых превращений в системах MO_2 - Ln_2O_3 (M = Zr, Hf; *Ln* = La, Gd, Y), синтезированных методом соосаждения с последующим прокаливанием смешанных гидроксидов (прекурсоров).

Установлено, что независимо от химического состава все синтезированные прекурсоры являются рентгеноаморфными веществами, в которых наблюдается наличие ближнего порядка. Изотермический отжиг прекурсоров приводит к дегидратации прекурсоров и кристаллизации соответствующих оксидов. Увеличение концентрации катионов РЗЭ в сложных оксидах на основе ZrO_2 и HfO_2 вызывает рост температуры кристаллизации и способствует протеканию фазовых переходов «моноклинная – тетрагональная – кубическая фаза». Показано, что независимо от типа РЗЭ все синтезированные образцы характеризуются существенной неэквивалентностью параметров локального окружения катионов Ln^{3+} и M^{4+}, причем исходная структура всех синтезированных порошков $Ln_2Zr(Hf)_2O_7$ описывается дефектной флюоритной структурой. В случае соединений $Ln_2Zr(Hf)_2O_7$ (*Ln* = La, Gd) при повышении температуры отжига наблюдается фазовый переход «беспорядок (флюорит) – порядок (пирохлор)», в то время, как в системах $Zr(Hf)O_2$-Y_2O_3 образующиеся твердые растворы сохраняют структуру флюорита.

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА КВАНТОВЫЙ СПИНОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ГИБРИДНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ

Меньшов В.Н.[1], Тугушев В.В.[1], Чулков Е.В.[2]
[1]*НИЦ «Курчатовский институт»*
[2]*Donostia International Physics Center*
e-mail: tuvictor@mail.ru

Спиновый эффект Холла (СЭХ) представляет собой своеобразное магнитоэлектрическое явление, при котором вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия при протекании электрического тока через немагнитный материал происходит пространственное разделение электронов с противоположными спинами и возникает индуцированный спиновый ток [1]. Недавно было обнаружено, что СЭХ достигает гигантских значений в ряде тяжелых немагнитных металлов (в частности, Ta) [2]. Вследствие значительной величины спин-холловского сопротивления ($R_{SH} \sim 0.5\ \Omega$) СЭХ может быть использован для эффективного перемагничивания ферромагнитных слоев (например, CoFeB) при создании быстрой энергонезависимой памяти с произвольным доступом типа MRAM [2,3]. Недавно также была показана перспективность использования СЭХ для создания спиновых мемристоров, моделирующих синапсы при разработке нейроморфных обучаемых систем, которые могут обладать высокой пластичностью при изменении длительности возбуждающего импульса и малой потребляемой энергией (около 1pJ/syn) [4].

В настоящей работе предлагается возможность радикального (до $R_{SH} \sim 10^3\ \Omega$, т.е. более чем на три порядка) увеличения спин-холловского сопротивления наноструктур за счет использования гибридных систем типа ФМИ/ТИ, где ФМИ - ферромагнитный изолятор (например, EuS, $BaFe_{12}O_{19}$, $Y_3Fe_5O_{12}$), ТИ-топологический изолятор (например, Bi_2Te_3 Bi_2Se_3). Такие наноструктуры, согласно нашим предсказаниям, способны обеспечить существенно более эффективное, чем в [4], перемагничивание ферромагнитных слоев при малой потребляемой энергии за счет проявления квантового спинового эффекта Холла [5].

В работе построена теоретическая модель квантового спинового эффекта Холла в гибридной наноструктуре ФМИ/ТИ, вызванного формированием топологических интерфейсных состояний. Показано, что механизм данного эффекта носит внутренний характер, связанный с особенностями зонной структуры (инверсией электронного спектра) и сильным спин-орбитальным взаимодействием в ТИ. При этом принципиальную роль играет кристаллическая структура ТИ, обусловливающая тип и величину интерфейсного потенциала, возникающего на контакте ФМИ/ТИ, что в свою очередь радикально влияет на спин-Холл сопротивление системы. На примере ТИ типа Bi_2Se_3 с кристаллической структурой тетрадимита, включающей проводящие пятислойники и Ван-дер-Ваальсовские промежутки между ними, рассчитана зависимость спин-Холловского сопротивления от положения химического потенциала системы, управляемого внешним напряжением. Построена фазовая диаграмма исследуемой системы, содержащая области нормальной и квантовой спин- Холл проводимости, в координатах интерфейсный потенциал-толщина ТИ пленки.

[1] H,Engel, arXivcond-mat/0603306v.3[cond-mat.mes-hall]23May, 2007.

[2] L. Liu, C. Pai, Y. Li, H.Tseng, D.Ralph, and R. Buhrman, Science 336, 555, 2012.

[3] A.Vincent, J.Larroque, N.Locatelli, N. Ben Romdhane et al., IEE trans.biomedical circuits and systems, 9, 66, 2015/

[4] A.Sengupta, Z.Al Azim, X.Fong and K.Roy, Appl.Phys.Letts.106,093704,2015.

[5] H.Weng, R.Yu, X.Hu, X.Dai and Z.Fang, Adv.Phys.64, 227, 2015.

ЛАЗЕРНЫЕ И СВЕРХКРИТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ТРЕХМЕРНЫХ НАНО- И МИКРОСТРУКТУР.

Минаев Н.В.[1], Рыбалтовский А.О.[2], Баграташвили В.Н.[1]
[1] *Институт фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына (НИИЯФ МГУ)*
e-mail: minaevn@gmail.com

Прогресс квантовой электроники во многом обусловлен созданием широкого класса новых оптических материалов, в том числе нанокомпозитных материалов. В последние годы значительное внимание уделяется композитным материалам, которые содержат в оптической матрице плазмонные наночастицы (например, Ag, Au). Продемонстрирована возможность получения структурированных нанокомпозитных материалов с помощью сверхкритических флюидных и лазерных технологий. Получены и охарактеризованы образцы полимерных и пористых оптических материалов, в которых были созданы периодические плоскостные структуры (параллельные поверхности образца) из наночастиц серебра с экстремально коротким периодом (90 – 180 nm) [1]; филаментарные структуры из наночастиц Ag и Au (5–90 μм толщиной и длинной до 5мм) [2], которые росли в процессе облучения параллельно оси лазерного пучка и другие типы структур. Созданы образцы кварцевых аэрогелей со структурами из наночастиц Ag и насыщенные соединениями редкоземельных металлов (Eu). Получены первые результаты по одностадийному формированию нанокомпозитных материалов с помощью сверхкритического коллоидного раствора металлических наночастиц, сформированному методом лазерной абляции. Полученные материалы перспективны для применения в фотонике.

[1] Bagratashvili V.N., Rybaltovsky A.O., Minaev N. V., Timashev P.S., Firsov V. V., Yusupov V.I. Laser-induced atomic assembling of periodic layered nanostructures of silver nanoparticles in fluoro-polymer film matrix // Laser Phys. Lett. - 2010. - Vol. 7 - № 5. - P. 401–404.

[2] Bagratashvili V.N., Minaev N.V., Rybaltovskii A.O., Yusupov V.I. Self-organization of filaments from Au particles in transparent solids, stimulated by laser photolysis of incorporated Au precursor // Laser Phys. Lett. - 2011. - Vol. 8 - № 12. - P. 853–858.

ТЕМПЕРАТУРЫ НАЧАЛА И КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА

Непомнящих А.И., Шалаев А.А., Сизова Т.Ю., Сапожников А.Н., Дёмина Т.В., Паклин А.С.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук
e-mail: ainep@igc.irk.ru

Устойчивость кварцевого стекла к кристаллизации является одной из важнейших характеристик этого материала, определяющей возможности его использования для изготовления высокотемпературной кварцевой керамики, работающей при высоких температурах и больших скоростях нагрева. Эти параметры необходимо учитывать при изготовлении, например, керамических радиопрозрачных оболочек антенных обтекателей высокоскоростных летательных аппаратов. Исследование процессов кристаллизации кварцевых стекол важно также для выявления общих закономерностей фазовых переходов стекло–кристалл.

В работе исследуются кварцевые стекла, полученные из кварцитов месторождения Бурал-Сардык [1]. В ходе исследования сравнивались стекла, полученные из химически обогащённых кварцевых концентратов двух типов: прошедших и не прошедших процесс кристобалитизации. Испытания на устойчивость к кристаллизации проводились согласно следующей схеме: кварцевые пластинки нагревались в муфельной печи на воздухе на кварцевой подложке до температуры 1000- 1250 ^{0}C со скоростью 180 ^{0}C/час. При температурах от 1000 до 1250 ^{0}C через 50 ^{0}C делалась выдержка 2 часа, после чего пластинки охлаждались со скоростью 300 ^{0}C/час. Метод контроля - визуальное наблюдение, фоторегистрация внешнего вида пластинок до и после испытаний, микроскопическопический, микрозондовый и рентгенографический анализ. По результатам визуального наблюдения показано, что в стеклах, изготовленных на основе кварцевых концентратов из суперкварцита и кристобалита микрозернистого кварцита при выдержке 2 часа при температуре 1200 ^{0}C не наблюдается кристаллизации - поверхность пластинки остается прозрачной без видимого помутнения. На основе кристаллоптических исследований показано, что при температуре 1150 ^{0}C начинается зарождение и рост изотропной кристаллической фазы кристобалита в стелах, полученных из кварцевых концентратов суперкварцита и кристобалитизированного мелкозернистого кварцита. В спектрах РФА всех образцов стекол появляются характерные линии фазы кристобалита при температуре 1150 ^{0} C.

[1] Воробьев Е.И. Спиридонов А.М., Непомнящих А.И., М.И. Кузьмин Сверхчистые кварциты Восточного Саяна (республика Бурятия, Россия) // Доклады Академии Наук. 2003. Т. 390. № 2. С. 219-223.

НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ПОРОШКИ ГАФНАТА ДИСПРОЗИЯ И НЕЙТРОНОПОГЛОЩАЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Петрунин В.Ф., Коровин С.А.
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
e-mail: VFPetrunin@mephi.ru

Одной из актуальных задач атомной энергетики является повышение ресурса работы АЭС, для чего, в частности, необходимо создание органов регулирования нового поколения с компактными радиационностойкими поглощающими сердечниками, обладающими высокой физической эффективностью. В качестве такого материала является перспективным использование гафната диспрозия, обладающего, а также высокой радиационной, коррозионной стойкостью и длительным ресурсом эксплуатации (до 20 лет). Но обычный крупнокристаллический порошок плохо компактируется, более перспективен нанопорошок [1].

В данной работе в качестве метода его синтеза был выбран и исследован способ химического осаждения из растворов солей (метод соосаждения). Отработаны режимы синтеза с применением микроволновой печи малоагрегированных, однофазных, нанокристаллических порошков гафната диспрозия. Изготовлены и аттестованы 6 опытных партий порошков гафната диспрозия. Показано, что синтезированные порошки гафната диспрозия имеют размер кристаллитов не более 10 нм и величину удельной поверхности не менее 10 м^2/г.

В качестве способа получения керамических таблеток – одноосное прессование нанокристаллических порошков с последующим изотермическим отжигом компактов, отработаны режимы прессования с получением плотных керамических таблеток гафната диспрозия. Изготовлены и аттестованы опытные партии таблеток гафната диспрозия. Показано, что полученные керамические таблетки имеют плотность от 8,25 до 9,10 г/см^3, коэффициент теплопроводности от 1,21 до 1,63 Вт/(м*К), термический коэффициент линейного расширения от 7,1 до 8,7*10^{-6}К$^{-1}$, модуль Юнга от 168 до 221ГПа [2].

[1] В.Ф.Петрунин, ФТТ, **56**, 170 (2014)
[2] V.F. Petrunin. Physics Procedia **72**, 536 (2015

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПЕРОВСКИТОВ

Политова Е.Д.[1], Калева Г.М.[1], Голубко Н.В.[1], Мосунов А.В.[1], Фортальнова Е.А.[1,2], Стефанович С.Ю.[1,3]

[1]*Научно-исследовательский физико-химический институт имени Л.Я. Карпова*

[2]*Университет Дружбы народов*

[3]*МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет*

E-mail: politova@cc.nifhi.ac.ru

В настоящее время актуальны исследования, направленные на разработку новых пьезоэлектрических материалов с более высокими рабочими температурами, в сравнении с составами на основе ЦТС, для применений в различных областях техники. Кроме того, токсичность производства свинец-содержащих оксидов диктует необходимость разработки материалов, не содержащих свинец.

К наиболее перспективным составам относятся оксиды со структурой перовскита на основе $(Na_{0.5}Bi_{0.5})TiO_3$ (NBT) и $(K,Na)NbO_3$ (KNN), характеризующиеся высокими значениями температуры Кюри ~700 K.

В данной работе изучены фазообразование, особенности структуры, диэлектрические и сегнетоэлектрические свойства керамик составов из области морфотропных фазовых границ в системах: $BiFeO_3$ - $BaTiO_3$ - $Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O_3$, (I), $(Na_{0.5}Bi_{0.5})TiO_3$ -$(K_{0.5}Bi_{0.5})TiO_3$ - $BiFeO_3$, (II) $(Na_{0.5}Bi_{0.5})TiO_3$-$BaTiO_3$ - $Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O_3$ (III) $(Na_{0.5}Bi_{0.5})TiO_3$ - $(K_{0.5}Na_{0.5})NbO_3$ - $BiFeO_3$ (IV), модифицированных добавками, способствующими понижению температуры спекания керамик. Фазовый состав, параметры структуры и свойства керамик I – IV изучали с использованием комплекса современных физико-химических методов.

Установлено влияние состава на параметры структуры и микроструктуры твердых растворов, выявлены СЭ фазовые переходы 1-го рода вблизи 700 – 800 К. Получено подтверждение улучшения пьезоэлектрических свойств керамик в системах I – IV.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект 15-03-03269).

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРИТА

Попов М.Ю.*[1,2,3], Овсянников Д.А.[1], Мордкович В.З.[1,3], Перфилов С.А.[1], Кульницкий Б.А.[1,3], Пережогин И.А.[1,4], Бланк В.Д.[1,2,3]

[1]*Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов*

[2]*Московский институт стали и сплавов*

[3]*Московский физико-технический институт (государственный университет)*

[4]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

e-mail: mikhail.popov@tisnum.ru

Недавно открытый нами каталитический синтез ультратвердого фуллерита (3D полимер C_{60}) [1-2] дает возможность широкого промышленного применения как ультратвердого фуллерита, так и материалов на основе его производных. При наличии катализатора давление 3D полимеризации фуллерена при комнатной температуре снижается с 18 до 6 ГПа (в условиях сдвиговых деформаций). С ростом температуры до 1100-1500 K давление синтеза снижается до 0.5-4 ГПа, однако при этом попутно образуются разнообразные фазы, производные от фаз фуллерита. Образование таких фаз понижает механические свойства (в частности, твердость снижается с 250 ГПа для ультратвердого фуллерита до 100 ГПа для образцов, содержащих смесь фаз производных фуллерита), однако при этом появляются новые, важные для практического использования, физико-механические свойства. Так, оказалось возможным синтезировать разнообразные сверхтвердые керамики (B_4C+C_{60}, Si_3N_4+C_{60}, c-BN+C_{60} и др.), имеющие твердость 55-60 ГПа и рекордное значение трещиностойкости 15 МПа $м^{0,5}$. При этом плотность образцов керамики B_4C+C_{60} составляет всего 2,2 $г/см^3$ при прочности на изгиб и сжатие соответственно 550 МПа и 2250 МПа. Образцы стабильны на воздухе до 1700 K.

[1] M. Popov, V. Mordkovich, S. Perfilov, A. Kirichenko, B. Kulnitskiy, I. Perezhogin, V. Blank. Carbon 76, 250-256 (2014).

[2] M. Popov, V. Blank, S. Perfilov, D. Ovsyannikov, B. Kulnitskiy, E. Tyukalova, V. Prokhorov, I. Maslenikov, I. Perezhogin, E. Skryleva, Yu. Parkhomenko. MRS Communications, (2015), **5**, 71–75.

МАГНИТНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК. СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА, ЭФФЕКТЫ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ

Рыльков В.В.[1], Николаев С.Н.[1], Черноглазов К.Ю.[1], Демин В.А.[1], Леванов В.А.[1,2], Васильев А.Л.[1], Пресняков М.Ю.[1] Ситников А.В.[3], Грановский А.Б.[2], Тугушев В.В.[1], Калинин Ю.Е.[3]

[1] Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

[2] Физический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова

[3] Воронежский Государственный Технический Университет

e-mail: vvrylkov@mail.ru

В диапазоне температур 4.2-300 K исследованы транспортные свойства пленочных нанокомпозитов $(Co_{41}Fe_{39}B_{20})_x(AlO_y)_{100-x}$ на основе нестехиометрического оксида AlO_y с содержанием ферромагнитного сплава вблизи перехода металл-диэлектрик (59>*x*>47 at.%). Данная система интересна своими магнитотранспортными свойствами, а также наблюдаемым в ней эффектом резистивного переключения под действием электрического поля, предположительно связанным с движением в диэлектрике вакансий кислорода, который может быть использован для создания мемристоров.

Установлено, что при содержаниях металла 56>*x*>49 at.% для проводимости выполняется логарифмический закон $\sigma(T) = a + b\ln T$, причем параметр *b* практически не зависит от *x*. Данная зависимость согласно теории [1] объясняется особенностями кулоновского взаимодействия в металл-диэлектрических нанокомпозитах в переходной области концентраций от металлической проводимости к диэлектрическому режиму. С использованием [1] показано, что параметр *b* определяется характерным размером ячейки перколяционного кластера *D*, который оказался ≈8 нм, причем совпадающим с оценкой размера гранул (2 - 7 нм) в этой системе из электронно-микроскопических исследований.

Впервые в нанокомпозитах в этих условиях обнаружен необычный скейлинг в поведении сопротивления (R_H) аномального эффекта Холла (АЭХ) от продольного сопротивления (R_{xx}): $R_H \propto (R_{xx})^m$, где параметр $m \approx 0.4$ при изменении температуры и $m \approx 0.24$ при изменении *x*. Обнаруженные особенности скейлинга связываются с проявлением туннельного АЭХ, обусловленного спин-орбитальным рассеянием электронов на дефектах (вакансиях кислорода) при их межгранульном туннелировании. [2]. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 16-19-10233.

[1] I.S. Beloborodov et al. // Rev. Mod. Phys., 2007, V.79, p. 469.

[2] A. Vedyayev et al. // Phys. Rev. Lett., 2013, V.**110**, p. 247204.

МОРФОЛОГИЯ СТРУКТУРЫ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ GLUCONACETOBACTER XYLINUS И ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ЕЕ ОСНОВЕ

Смыслов Р.Ю.[1,2], Ездакова К.В.[2], Копица Г.П.[2,3], Хрипунов А.К.[1], Бугров А.Н.[1], Ткаченко А.А.[4], Angelov B.[5], Pipich V.[6], Szekely N.K.[6], Баранчиков А.Е.[7], Латышева Е.[8]

[1]Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург

[2]НИЦ КИ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина

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

[4] Санкт-Петербургский Государственный Университет, Биологический факультет, Санкт-Петербург

[5]Institute of Physics ASCR, ELI Beamlines, Prague, Czech Republic

[6] JCNS, Forschungszentrum Juelich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany

[7]Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

[8] РЦ СПбГУ «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники», Санкт-Петербург

e-mail: kopitsa@lns.pnpi.spb.ru

Методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), ультра малоуглового рассеяния нейтронов (УМУРН), малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР), а также низкотемпературной адсорбции азота изучена микро- и мезоструктура полимерной матрицы, полученной из воздушносухой, предварительно дезинтегрированной нано-гель-плёнки целлюлозы, выращенной в процессе биосинтеза Gluconacetabacter xylinus, и композитов на её основе с добавлением наночастиц ZrO2, ионов Tb3+ в виде низкомолекулярной соли и металл-полимерного комплекса с сополимером винилпирролидона и метакрилоил-орто-аминобензойной кислоты. Комплексный анализ полученных данных показал, что полимерная матрица и композиты на её основе представляют собой сложные системы с трехуровневой иерархической фрактальной организацией структуры. Выявлено, что как состав, так и агрегатное состояние используемых в процессе синтеза легирующих добавок оказывают существенное влияние на структурные характеристики органо-неорганических композитов. Также установлено, что композиты, содержащие ионы Tb3+, обладают эффективной люминесценцией, причем в случае содержания металл-полимерного комплекса она на порядок выше. Определено оптимальное содержание наночастиц ZrO2 необходимых для усиления эффекта люминесценции ионов Tb3+ в композите.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-02-00987).

КОМПОЗИЦИОННЫЕ ТЕРМОЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ГЕНЕРАТОРОВ (ТЭГ)

Сорокин А.И., Панченко В.П., Лаврентьев М.Г., Нарожная О.Е.
АО «Гиредмет»
e-mail: almaz_gx@mail.ru

Сейчас во всем мире большие усилия направлены на поиск и разработку альтернативных, прежде всего возобновляемых, источников электроэнергии. Это связано с тем, что происходит постоянное возрастание потребности в электроэнергии, основная доля которой производится за счет сжигания органического ископаемого топлива. Преимуществами термоэлектрических преобразователей энергии являются надежность и большой ресурс работы, отсутствие необходимости текущего обслуживания, нечувствительности к вибрации, экологическая чистота.

Обилие реальных источников неиспользуемого бесплатного тепла как техногенного, так и природного происхождения представляет огромный потенциал для его термоэлектрического преобразования в электроэнергию. Однако соответствующее этому потенциалу расширение областей использования термоэлектричества в современной энергетике сдерживается относительно малым значением КПД ТЭГ.

Для повышения КПД необходимо увеличить добротность (ZT) термоэлектрического материала (ТЭМ) и расширить рабочий диапазон температур. Эффективность термоэлементов зависит от параметра ZT используемых материалов. К сожалению, этот параметр зависит от температуры и для большинства ТЭМ его максимальное значение находится в небольшом температурном интервале.

С целью расширения температурного диапазона рабочих температур ТЭГ весьма перспективной является концепция получения композиционного термоэлемента, состоящего из слоев ТЭМ с максимальной величиной добротности $ZT_{макс}$ при различных температурах.

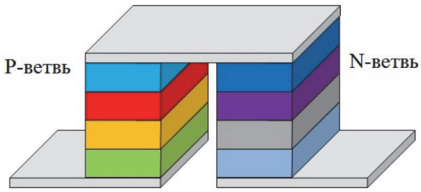


Рис.1. Рисунок композиционного термоэлемента.

Экспериментальной работе предшествовали расчеты архитектуры композиционной ветви с целью выбора оптимальных размеров отдельных секций, что оказывает существенное влияние на КПД. Первые экспериментальные результаты показали преимущества композиционных термоэлементов из согласованных ТЭМ.

НОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В СИСТЕМЕ НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИ-N-ВИНИЛКАПРОЛАКТАМ/ОКСИДЫ ТИТАНА(IV) И ИХ ПРИРОДА

Тимаева О.И., Кузьмичева Г.М., Чихачева И.П.
Московский технологический университет, МИТХТ
e-mail: gertrudejames@mail.ru

Одно из актуальных направлений нанотехнологии - создание нанокомпозитов с полимерами в качестве основы и неорганическими фазами в роли функциональных наночастиц. В этой связи перспективными представляются нанокомпозиты с матрицей поли-N-винилкапролактама (ПВК), обладающего хорошей растворимостью, биологической совместимостью и низкой токсичностью, и наночастицами оксидов титана (IV) (НДТ), которые демонстрируют адсорбционные, фотокаталитические и другие свойства. Известно, что свойства нанокомпозитов зависят от состава, строения и условий синтеза. Цель работы – установление взаимосвязи характеристик исходных образцов (НДТ, ПВК) и нанокомпозитов НДТ/ПВК в зависимости от способа их получения.

Впервые получены нанокомпозиты НДТ/ПВК механическим перетиранием (*способ 1*), физическим высаживанием (*способ 2*) и механоактивацией в шаровой мельнице (*способ 3*) смеси разных ПВК, отличающихся температурой сушки водного раствора ПВК, и НДТ (Hombifine N, Hombikat UV100; анатаз, η-фаза, пероксидная фаза) с разными физико-химическими свойствами. Установлена принципиальная разница между образцами полимера (содержание воды, степень аморфности, размеры надмолекулярных структур) в виде пленок и порошков. Выявлены новые эффекты в исходных ПВК (механодеструкция) и НДТ (частичная кристаллизация), а также в ПВК (механокрекинг) и НДТ (фазовые и полиморфные переходы, изменение степени кристалличности), входящих в состав нанокомпозитов НДТ/ПВК. Показана роль способа получения и природы исходных компонентов (НДТ и ПВК) в специфике проявляемых эффектов.

Установлено, что присутствие ПВК в системе НДТ/ПВК (*способ 2*) увеличивает фотокаталитическую активность композитов в ~2 раза по сравнению с исходными НДТ. Обнаружены бактериостатические свойства образцов синтезированных НДТ (анатаз, η-фаза).

ЭВОЛЮЦИЯ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ПО РАЗМЕРАМ В РАСТВОРАХ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} В NMП

Тропин Т.В.[1], Жаргалан Н.[1], Авдеев М.В.[1,2], Аксенов В.Л.[1,2]
[1] *Лаборатория нейтронной физики, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна МО, Россия*
[2] *Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина ЛО, Россия*
e-mail: ttv@jinr.ru

Фуллерены C_{60} – новая аллотропная форма углерода, открытая в конце прошлого столетия, вызывают большой интерес исследователей. Растворы фуллерена являются перспективной системой для исследований, в том числе благодаря своим потенциальным применениям, а также ряду интересных явлений, обнаруженных в этих системах [1]. К этим явлениям относятся образование и рост кластеров, сольватохромизм и другие.

Настоящая работа посвящена развитию теоретических методов описания кинетики кластерообразования в полярных растворах фуллерена. В полярных растворах наблюдается медленный рост крупных устойчивых агрегатов C_{60} [2], который, как предполагают исследователи, непосредственно связан с образованием в растворе комплексов C_{60}-растворитель [3]. Рассматриваются экспериментальные данные по растворам C_{60} в N-метилпирролидоне (NMП), как наиболее изученной системе. Для описания эволюции кластерного состояния применяется подход, основанный на решении системы кинетических уравнений для функции распределения кластеров по размерам в растворе. С использованием развитых ранее моделей, получено решение данных уравнений в широком временном интервале эволюции системы. Полученные решения используются для расчета данных по малоугловому рассеянию нейтронов. Обсуждаются способы оценки других экспериментальных данных по выполненным теоретическим расчетам функции распределения кластеров по размерам.

[1] M.B. Авдеев, В.Л. Аксенов, Т.В. Тропин, // Журнал Физической Химии. 84 (2010) 1405–1416.

[2] T.V. Tropin, N. Jargalan, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, R.A. Eremin, D. Sangaa, et al. // J. Mol. Liq. 175 (2012) 4–11.

[3] O. A. Kyzyma, M.V. Korobov, M.V. Avdeev, V.M. Garamus, S.V. Snegir, et al. //Chem. Phys. Lett. 493 (2010) 103–106.

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА В ОБРАТНЫХ МИЦЕЛЛАХ

Тытик Д.Л.[1], Высоцкий В.В.[1], Ревина А.А.[1], Суворова О.В.[1], Бусев С.А.[1], Кузьмин В.И.[2], Гадзаов А.Ф.[2]
[1] *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН*
[2] *Московский технологический университет*
e-mail: dltytik@rambler.ru

В [1] установлено, что шумовая компонента в спектрах оптического поглощения, регистрируемая приборами высокого разрешения (Hitachi-3310) в процессе синтеза наночастиц (НЧ), содержит информацию о релаксационных (Рл) свойствах обратномицеллярной системы (ОМС), определяющих кинетику процесса в целом. ОМС является удобной моделью для исследования физико-химических процессов, происходящих в живых клетках.

В настоящей работе исследована кинетика отдельных стадий процесса синтеза НЧ металлов (Au, Ag) в ОМС (Аэрозоль ОТ/изооктан/кверцетин-Qr): мицеллообразование, солюбилизация ($w = 2 – 40$) и синтез НЧ (метод ДРС; $\lambda = 633$ нм). Показано, что процессы формирования мицелл носят квазипериодический характер. Определены значения почти-периодов для эмпирических функций изменения размеров ОМ, обратные величины которых являются параметрами Рл физико-химических процессов разного уровня организации ОМС. Обнаружено, что в процессе химического синтеза (например, синтез НЧ Ag) на разных стадиях реакции появляются НЧ с размерами, лежащими в диапазонах: 0.67 ÷ 1.7 nm (≈ 18%); 7 ÷ 31 нм (≈ 51 %); 3000 ÷ 5500 nm (≈ 25 %). Проценты показывают суммарное количество, соответствующей фракции НЧ в ОМС за все время синтеза, примерно за 5 ч.

Построены математические модели, описывающие формирование ОМС и позволяющие выбрать эффективные параметры химического синтеза (температура, концентрация восстановителя Qr) НЧ благородных металлов (Au, Ag) с учетом Рл характеристик нанореакторов (обратные мицеллы).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-03-00665 и Минобрнауки, грант № 3481 “Фильтр”

[1]. Кузьмин В.И., Гадзаов А.Ф. и др. // А.А. Коллоидный журнал, 2015, том 77, № 4, с. 477–491.

МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ ZrO_2 НА СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ Al_2O_3-МУНТ

Файков П.П., Зыонг Ч.Т.Т., Попова Н.А., Жариков Е.В.
РХТУ им. Д.И. Менделеева
e-mail: faikov_p@inbox.ru

Керамоматричные композиты Al_2O_3 с углеродными нанотрубками демонстрируют высокие прочность при изгибе трещиностойкость, стойкость к вибрациям и термоудару [1]. Альтернативным способом повышения механических свойств керамики на основе Al_2O_3 является введение добавки ZrO_2 [2]. В настоящей работе изучено влияние одновременного введения многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) и ZrO_2 на упрочнение композита. Композиты, содержавшие МУНТ (2-50 % об.), синтезировали двумя методами: спеканием в аргоне без приложения давления и методом искрового плазменного спекания.

В отсутствие МУНТ или при малых концентрациях МУНТ, мелкие зерна ZrO_2 распределяются по границам кристаллитов и, тем самым, ограничивают рост зерен корунда. МУНТ создают микросетки, сдерживающие рост зерен корунда и препятствующие равномерному распределению частиц ZrO_2 по границам зерен Al_2O_3. Кроме того, МУНТ входят также в сами зерна корунда и образуют “мостики” между ними.

При воздействии нагрузки, напряжение рассеивается на МУНТ-микросетке. При этом, микротрещины хотя и возникают, но мостики УНТ способствуют перераспределению нагрузки на соседние зерна. В результате увеличивается трещиностойкость и прочность композита. С увеличением содержания УНТ, эффект микросетки становится сильнее, что приводит к формированию крупных агломератов ZrO_2 в матрице и соответствующему уменьшению плотности распределения частиц ZrO_2, вследствие чего вероятность встречи трещины с зерном диоксида циркония снижается, и, упрочнение, связанное с трансформационным переходом ZrO_2 становится незначительным.

[1] Inam F., Yan H. et al. Composites Science and Technology, 2010, Vol.70, p. 947-952.

[2] Takano Y., Ozawa T. et al. J. Mater. Synthesis and Processing, 1999, Vol. 7, No. 2, p. 107-111.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 14-19-00522.

СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ИОНОВ Fe В НАНОПРОВОЛОКАХ Fe-Co И Fe-Ni, ПОЛУЧЕННЫХ В ПОРАХ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН

Фролов К.В.[1], Перунов И.В.[1], Коротков В.В.[1,2], Бедин С.А.[1,3], Загорский Д.Л.[1], Любутин И.С.[1], Хмеленин Д.Н.[1], Артёмов В.В.[1], Сульянов С.Н.[1]
[1]Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
[2]Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
[3]Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия
e-mail: green@crys.ras.ru

Массивы нанопроволок магнитных металлов Fe, Co, Ni вызывают интерес исследователей из-за перспектив применения подобных объектов в устройствах хранения информации повышенной плотности, сенсоров, магниторезестивных и магнитооптических устройствах малого размера [1]. Одним из способов получения подобных массивов является гальваническое заполнение металлом пор полимерных трековых мембран.

В данной работе методами электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe исследованы фазовый состав, структурные, электронные и спиновые состояния ионов железа в нанопроволоках Fe-Co и Fe-Ni, полученных электрохимическим осаждением металлов в поры полиэтилентерефталатных трековых мембран. Диаметр нанопроволок составлял 30 – 200 нм, длина – около 10 мкм. Обнаружено, что фазовый состав нанопроволок представляет собой комбинацию ОЦК и ГЦК фаз Fe-Co и Fe-Ni сплавов с различным локальным окружением ионов железа. Все исследованные образцы были магнитоупорядочены и продемонстрировали выделенную ориентацию намагниченности внутри нанопроволок, спонтанно формирующуюся в процессе электроосаждения без приложения внешнего магнитного поля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-08-04949), РНФ (проект № 14-12-00848), Минобрнауки РФ с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

[1] N. Lupu, Electrodeposited Nanowires and Their Applications. InTech, 2010.

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОЗДАНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ С ЗАДАННОЙ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ И ТЕХНОЛОГИЙ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

Чаусов Ф.Ф.[1,2,3], Сомов Н.В.[4], Закирова Р.М.[1], Решетников С.М.[1]

[1]ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»

[2] Физико-технический институт УрО РАН

[3] Институт механики УрО РАН

[4] Национальный исследовательский университет им. Н. И. Лобачевского

e-mail: chaus@udsu.ru

Создание эффективных ингибиторов коррозии с заданной структурой и свойствами актуально из-за огромных потерь от коррозии, в первую очередь, сплавов железа – 10–15% располагаемого металлофонда в год. Комплексы металлов с хелатообразующими лигандами зарекомендовали себя как ингибиторы коррозии металлов.

Выпускаемые сейчас металлохелатные ингибиторы разрабатывали без учёта их молекулярной структуры и кристаллической упаковки. Вследствие этого они являются смесью соединений с различной структурой – ингибиторов, катализаторов коррозии и индифферентных веществ. При хранении они отсыревают, слёживаются и быстро утрачивают противокоррозионные свойства.

Исследования кристаллохимических аспектов взаимодействия хелатообразующих лигандов с ионами металлов, структуры получаемых комплексов, их выделение в чистом виде, изучение кристаллической структуры защитных слоёв и механизма их формирования позволили авторам создать технологии селективного синтеза эффективных ингибиторов коррозии с заданной структурой и свойствами.

Созданы многофункциональные препараты, сочетающие противокоррозионные, противонакипные и бактерицидные свойства.

На этой основе созданы технологии защиты металлов в соле- и кислородсодержащих водных средах, технологии самосборки многослойных покрытий с металлохелатным интерфейсом и гидрофобным покровным слоем.

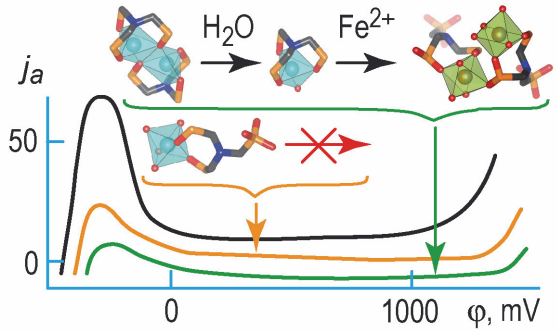


Рис.1. Зависимость эффективности ингибирования коррозии (снижение тока растворения железа j_a в анодной области потенциала φ) от структуры комплексов нитрилотрисметиленфосфоновой кислоты с цинком и их способности к формированию гетерополинуклеарных Fe–Zn комплексов.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЛИТЕЛЬНОГО ПРИЕМА НАНОЧАСТИЦ НА ПОВЕДЕНЧЕСКИЕ И КОГНИТИВНЫЕ ФУНКЦИИ МЫШЕЙ

Анциферова А.А.[1,2], Григорьева Л.Н.[1,3], Копаева М.Ю.[1]
[1]*НИЦ «Курчатовский институт»*
[2]*Московский физико-технический институт (государственный университет)*
[3] *МГУ им. М.В. Ломоносова*
e-mail: antsiferova_aa@nrcki.ru

Современные исследования транспорта наночастиц серебра в организме лабораторных млекопитающих свидетельствуют об эффекте накопления серебра в головном мозге [1]. Кроме того, продемонстрировано, что некоторые наночастицы способны преодолевать гематоэнцефалический барьер [2]. Такие исследования указывают на потенциальную небезопасность относительно длительного приема наночастиц серебра млекопитающими. В данной работе было проведено комплексное исследование влияния одно- и двухмесячного ежедневного перорального введения наночастиц серебра марки «Арговит-С» на некоторые поведенческие и когнитивные функции мышей линии C57Bl/6. В конце каждого этапа приема препарата оценивали двигательную активность, исследовательское поведение, тревожность и долговременную память животных в ряде тестов: открытом поле, приподнятом крестообразном лабиринте, темно-светлой камере и камере условно-рефлекторного замирания. Кроме того, оценивали физиологические особенности животных в системе мониторинга PhenoMaster. На основании проведенного исследования сделано заключение о влиянии накопления наночастиц серебра в головном мозге на изученные поведенческие и когнитивные функции.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00850 мол_а.

[1] Antsiferova A., Buzulukov Yu., et al. Extremely low level of Ag nanoparticle excretion from mice brain in in vivo experiments // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, 2015, V. 98, http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1757-899X/98/1/012003/meta

[2] Анциферова А.А., Бузулуков Ю.П. и др. Метод радиоактивных индикаторов и нейтронно-активационного анализа для исследований биокинетики наночастиц в живом организме // Российские Нанотехнологии, 2015, Т.10, №1-2, стр. 84-91.

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОПОЛИМЕРОВ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА (СКФ32, Ф42, Ф2М), ГРАНУЛИРОВАННЫХ Mn-Zn и Ni-Zn ФЕРРИТОВ И КОМПОЗИТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Астахов В.А.[1], Мингажева З.В.[1], Шакирзянов Р.И.[1], Аргымбек Б.К.[1,3], Кочервинский В.В.[2], Коровушкин В.В.[1], Бессонова Н.П.[2], Кичанов С.Е.[3], Королев Ю.М.[4], Мирошин С.В.[1], Морченко А.Т.[1], Андреев В.Г.[1]
[1]*НИТУ «МИСиС»*
[2]*НИФХИ им. Л.Я. Карпова*
[3]*ОИЯИ*
[4]*ИНХС РАН им. А.В. Топчиева*
e-mail: dratm@mail.ru

С помощью методов рентгеновской дифрактометрии, инфракрасной спектроскопии и дифференциальной сканирующей калориметрии изучены образцы полимеров СКФ32, Ф42, Ф2М, приготовленных из растворов и из расплавов. Установлено, что пленочные образцы Ф42, Ф2М, в которых наблюдается присутствие кристаллической β-фазы, являются полярными пьезоэлектриками с высокой долей кристалличности, а пленки СКФ32 не имеют симметрии дальнего порядка и являются аморфными.

Методами сканирующей электронной микроскопии, азотной порометрии, Мёссбауэровской спектроскопии, нейтронной и рентгеновской дифрактометрии исследована кристаллическая и магнитная структура гранулированных порошков марганец-цинковых и никель-цинковых ферритов $Mn_{0.58}Zn_{0.26}Fe_{2.16}O_4$, $Mn_{0.68}Zn_{0.23}Fe_{2.09}O_4$ и $Ni_{0.32}Zn_{0.68}Fe_2O_4$ различного гранулометрического состава (фракции с размером частиц <45 мкм и до 1000 мкм). Определена зависимость длин связей в элементарной ячейке от размера гранулированных частиц, изучено распределение магнитных моментов по октаэдрическим и тетраэдрическим подрешеткам ферримагнетиков.

Изучены структурные характеристики композитных материалов на основе матриц из сополимеров поливинилиденфторида («полимер Ф42 / Mn-Zn феррит 2000НМ», «полимер СКФ32 / Mn-Zn феррит 2000НМ», «полимер Ф2М / Mn-Zn феррит 2000НМ»). Показано, что вводимые частицы феррита (наполнитель) могут служить дополнительными центрами кристаллизации в полимере Ф42, в то время как для полимера Ф2М вводимый феррит ингибирует процесс образования кристаллической фазы в объеме полимера.

ФАЗОВЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СИСТЕМ (1-X)KNO_3 + XAL_2O_3

Атаев М.Б.[1], Рабаданов М.Х.[2], Эмиров Р.М.[2], Рабаданов К.Ш.[1,2], Амиров А.М.[1]

[1] ФГБУН Дагестанский научный центр Российской академии наук, Аналитический центр коллективного пользования.

[2] ФГБОУ ВО Дагестанский государственный университет

e-mail: a_mansur@mail.ru

Исследования влияния инертных твердых добавок на физико-химические характеристики ионных конденсированных систем приобретают чрезвычайную актуальность в виду того, что в ряде случаев «наполнение» ионной соли частицами оксида приводит к росту ионной проводимости в композите. Открываются широкие возможности для развития технологий синтеза новых ион проводящих композитных систем на основе ионных солей и оксидов различного состава, размера и т.д. Для ионных конденсированных систем это обстоятельство имеет важное прикладное значение, имея в виду широкое их использование в качестве электрохимических систем в различных устройствах.

Впервые эффект увеличения ионной проводимости соли при гетерогенном наполнении инертным оксидом был обнаружен в работе С. Лианга [1]. С тех пор появилось много работ, посвященных изучению этого явления. В основном в этих работах в качестве твердого наполнителя использовались порошки оксидов металлов микроскопических размеров. Вместе с тем недавние исследования показали [2], что эффект гетерофазного наполнения ионных систем зависит от размера частиц твердого наполнителя, а в случае наноразмерных частиц оксида в силу специфических поверхностных свойств наночастиц сами подобные нанокомпозитные системы приобретают особые свойства. Очевидно, что гетерофазное допирование может привести к заметным изменениям структуры и фазового состава солевой компонента композита. В частности, в ряде работ [1–6] показано, что гетерогенное допирование приводит к образованию аморфных высокопроводящих фаз солей, образующихся на границе раздела двух компонент соль – наноразмерный инертный оксид. Целью настоящей работы являлось исследование и анализ фазового состава и структурных особенностей нитрата калия KNO_3 и его композитов с наноразмерным оксидом алюминия Al_2O_3.

Для синтеза композитов $(1–x)KNO_3 + xAl_2O_3$ были использованы: нитрат калия (квалификация ХЧ, «Экрос»), нанокристаллический оксид алюминия γ-Al_2O_3 (99%, «ABCR») с величиной удельной поверхности S_{spec} = 120 m^2/g и размером ~ 15–25 nm. Синтез исследуемых образцов проводился по керамической методике [5]. Было подготовлено два нанокомпозита с содержанием Al_2O_3 в 50 mol% (x = 0,5) и 70 mol% (x = 0,7). Рентгеновские дифрактограммы образцов снимались на дифрактометре Empyrean фирмы PANalytical.

По полученным дифрактограммам проведено уточнение кристаллических структур методом Ритвельда. Факторы расходимости и Goodness-of-Fit для уточненных моделей составили: R_p/ R_{wp} = 2,01/2,66, GoF=2,63 для x=0,5 и R_p/ R_{wp} = 2,3/2,91 GoF=3,16 для x = 0,7.

По результатам уточнения установлено, что в композитах $(1–x)KNO_3 + xAl_2O_3$ образуется дополнительная, высокотемпературная, ромбоэдрическая фаза нитрата калия (фаза III) с параметрами решетки a = 5,4644 Å, c = 9,0842 Å, которая является наноразмерной и достаточно стабильной, не исчезая ни при охлаждении, ни при механическом воздействии, ни со временем. В обоих составах проведена оценка размера кристаллитов KNO_3 – фазы III, который, с учетом погрешности измерений и метода в данном случае составил более 20 nm. Обнаружено, что с увеличением концентрации нанопорошка Al_2O_3 содержание основной фазы нитрата калия (фаза II) значительно уменьшается, при этом растет относительная доля фазы III в общем содержании нитрата в составе композита. Вероятнее всего, она образовалась на межфазной границе KNO_3 – Al_2O_3 при спекании и последующем охлаждении нанокомпозита. Ее стабилизацию можно объяснить межфазным взаимодействием на границе KNO_3 – Al_2O_3. Можно предположить, что в результате спекания композита нитрат калия распределился по поверхности оксида алюминия, частицы нитрата значительно уменьшились в размерах, в результате поверхностная энергия этих малый частиц могла быть настолько большой, что термодинамически равновесной фазой могла оказаться метастабильная высокотемпературная фаза III. Кроме того, возможно данная фаза III была «заморожена» в нанокомпозите. Al_2O_3 значительно замедлил скорость фазового перехода в композите, и высокотемпературная фаза могла быть охлаждена до комнатной температуры не претерпевая фазового перехода в основное состояние. На основании полученных данных сделано заключение, что при высоких концентрациях порошка наноразмерного Al_2O_3 (x = 0,7) практически весь нитрат калия распределяется по поверхности оксида алюминия в виде наноразмерной, высокотемпературной фазы III, и в свободном состоянии в виде микрокристаллитов, в данном композите KNO_3 – фаза II присутствует лишь в следовых количествах.

[1] Liang. C.C.// J. Electrochem. Soc. 1973, vol 120, issue 10, pp. 1289-1292.

[2] Уваров Н.Ф., Улихин А.С., Матейшина Ю.Г.// Химия в интересах устойчивого развития. 2012, том 20, № 1, с. 95-103.

[3] Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Алиев А.Р., Амиров А.М., Кубатаев З.Ю.// Журн. структурной химии. 2015, том 56, №3, с 457-465.

[4] Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Амиров А.М., Кубатаев З.Ю., Какагасанов М.Г.// ФТТ, 2015, том 57, №10, с 2011-2017.

[5] Uvarov N.F., Hairetdinov E.F., Skobelev I.V.// Solid State Ionics, 1996, vol. 86–88, pp.577-580.

[6] Uvarov N.F., Vanek P., Yuzyuk Yu.I.// Solid State Ionics, 1996, vol.90, pp.201- 207.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНСТРУКТУР ГРАФЕН-МАГНЕТИТ МЕТОДАМИ МЕССБАУЭРОВСКОЙ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Баскаков А.О.[1], Старчиков С.С.[1], Shih K.Ya.[2], Lin C.R.[2], Любутин И.С.[1]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Department of Applied Physics, National Pingtung University

e-mail: arseniybaskakov@gmail.com

Новая аллотропная форма углерода – графен (Г) вызывает большой научный интерес благодаря его специфическим оптическим, электронным, механическим и термическим свойствам [1]. Поэтому графен является очень перспективным материалом в областях физики, химии, биологии, медицины и материаловедении. Абсолютно новой областью в изучении графена являются нанокомпозиты, состоящие из графена, модифицированного неорганическими наночастицами (НЧ). Благодаря особым свойств как графена, так и магнитных наночастиц, нанокомпозиты графена, модифицированного магнетитом, могут применяться в таких областях как адресная доставка лекарств, материалы для анодов в литий-ионных аккумуляторах.

Мессбауэровские исследования таких композитов могут дать важную информацию об особенностях взаимодействия НЧ и Г, о структурных и магнитных свойствах, о размерных эффектах и особенностях синтеза.

Использование мессбауэровской спектроскопии, рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии для характеризации как свойств графена, так и свойств наночастиц, которыми он был модифицирован, дает возможность получить большое количество информации о нанокомпозитах Г- Fe_3O_4 и их свойствах.

В нашем исследовании при различных условиях были синтезированы серии образцов графен – магнетит (Г- Fe_3O_4) и оксид графена – магнетит (ГО- Fe_3O_4). При различных температурах были изучены мессбауэровские и рамановские спектры таких наноструктур.

Обнаружено, что фаза маггемита (гамма- Fe_2O_3) присутствует во всех образцах вместе с фазой магнетита. Из расчетного распределения магнитных полей на ядрах железа установлено присутствие компоненты с малым полем, что может быть связано с эффектом поверхности. Эти компоненты могут содержать информацию о взаимодействии между графеном и магнитными наночастицами. Существование парамагнитного дублета может быть объяснено суперпарамагнитными свойствами малых частиц (с размером менее 10 нм), которые могут присутствовать в образцах из-за специфического распределения размеров частиц.

Благодарности

Работа поддерживается Российским научным фондом (проект #14-12-00848).

[1] Singh V. et al. Graphene based materials: past, present and future //Progress in materials science. – 2011. – Т. 56. – №. 8. – С. 1178-1271.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ И ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ. ЭФФЕКТ МАТРИЦЫ

Белогорохов И.А[1], Белогорохова Л.И.[2], Дронов М.А.[2], Котова М.С.[2]

[1] ИФАВ РАН

[2] МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет

e-mail: jugqwerty@mail.ru

При анализе свойств композицитных материалов всегда следует помнить о том факте, что композиционный материал является сложной системой, свойства которой не всегда однозначно складываются из свойств составляющих ее частей. К примеру, в работах по фотолюминесценции органических полупроводников – известно такое явление, как влияние свойств матрицы на люминесцентные свойства, как добавки, так и всего композиционного материала. В своей работе мы называем данный эффект эффектом матрицы. Как показали полученные результаты, эффект матрицы может проявляться не только в системах жидкость-жидкость или жидкость-твердое тело. При этом следует отметить, что спектр фотолюминесценции полимерной композиционной структуры, состоящей из свободных лигандов представляет собой широкую полосу с двумя различимыми максимумами на длинах волн 656 нм (1,57 эВ) и 787 нм (1,87 эВ). Спектр полистирольной матрицы без фталоцианиновых примесей не представляет четких максимумов фотолюминесценции с высокой интенсивностью. Сами же гетероциклические комплексы (фталоцианины) обладают тремя максимумами в видимом диапазоне спектра. Спектральные координаты максимумов следующие: 888 нм (1,4 эВ), 760 нм (1,6 эВ) и 708 нм (1,75 эВ) соответственно. Аппроксимация экспериментальной кривой тремя лоренцианами позволила установить, что наибольший вклад в наблюдаемые зависимости сигнала ФЛ в красной области дает максимум, расположенный на 880 нм, а максимум ФЛ в области 760 нм имеет максимальную интенсивность.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 15-32-70017 «мол_а_мос».

РФЭС СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ

Белогорохов И.А.[1], Белогорохова Л.И.[2], Дронов М.А.[2], Котова М.С.[2]
[1] ИФАВ РАН
[2] МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет
e-mail: jugqwerty@mail.ru

Аналитические методы современной химии позволяют проводить научно-поисковые работы с любыми типами материалов. Полупроводники, металлы, диэлектрики – ученые могут узнать любую информацию об их свойствах. Но задача современных подходов также должна меняться, поскольку появляются новые классы веществ, во многом отличающиеся от своих традиционных предшественников. Одним из немногих методов, позволяющих проводить определение элементов на поверхности, а также исследовать их химические состояния, является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС). Благодаря высокой поверхностной чувствительности РФЭС является незаменимым методом для исследования микросхем и тонких пленок.

Полученные в ходе экспериментальных результатов данные показали, что в случае композитного материала на основе фталоцианина, потолок валентной зоны формируется не только из углеродных состояний. В энергетический спектр валентной зоны композитного материала на основе фталоцианина также вносят свой вклад энергетические состояния атомов азота, входящих в структуру гетероцикла. Наблюдаемое различие можно объяснить влиянием ионов редкой земли на зонную структуру композитного материала. Доминантный вклад в описание проводящих свойств композитного материала вносят именно входящие в его состав молекулы фталоцианинов (гетероциклов). Поскольку именно они наиболее интенсивно поглощают электромагнитное излучение видимого диапазона, то есть задают темп генерации неравновесных носителей заряда (дырок) и, тем самым, усиливают резистивные переключения в образцах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 15-32-70017 «мол_а_мос».

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Белогорохов И.А[1], Белогорохова Л.И[2], Дронов М.А.[2], Котова М.С.[2]
[1] ИФАВ РАН
[2] МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет
e-mail: jugqwerty@mail.ru

Описание процессов в таких сложных системах, как композитные материалы – задача достаточно трудная. Основная сложность указанной тематики заключена не столько в решении сложных уравнений, сколько в выборе грамотного теоретического подхода, описывающего происходящие в материале процессы.

В ходе анализа существующих теоретических подходов, были выбраны традиционные приближения, позволяющие описать спектральные характеристики органического материала, но с учетом существующего «эффекта матрицы». Взаимодействие гетероциклического комплекса с матрицей композита было представлено исходя из представлений о композите как о фрактальной структуре.

В рамках выполненных работ было проведено описание светоизлучающих свойств композитных материалов в рамках процесса эволюции электрон-дырочных пар, образующихся в композите под воздействием внешнего источника возбуждения. Аннигиляция экситонов в полимере происходит в результате рекомбинации зарядов посредством перехода валентного электрона из радикала красителя на катион-радикал соседнего комплекса (матрицы или другой примеси композита). Итоговая зависимость для описания экспериментальных кривых бралась приближении последовательной сенсибилизацией с переносом электрона. В этом случае электрон красителя под действием первого кванта света переходит на первый возбужденный уровень красителя и затем, подвергаясь воздействию второго кванта, переходит на второй возбужденный уровень красителя и далее — в зону проводимости кристалла. Но в общем случае, при описании процессов люминесценции (излучения фотонов) в композитном материале следует учитывать еще три возможные схемы возбуждения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 15-32-70017 «мол_а_мос».

ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЖНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОКСИДОВ МАРГАНЦА И ЖЕЛЕЗА ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Белозерова Н.М.[1], Кичанов С.Е.[1], Лукин Е.В.[1], Козленко Д.П.[1], Jirak Z.[2], Савенко Б.Н.[1]

[1] Объединенный институт ядерных исследований

[2]Институт физики

NMBelozerova@jinr.ru

Перовскитоподобные манганиты $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ и шпинели $Cu_{0.7}Zn_{0.3}$ $Fe_{1.5}Ga_{0.5}O_4$ проявляют большое разнообразие свойств в зависимости степени легирования и размера частиц. Сильная корреляция между различными физическими свойствами манганитов и шпинели приводит к высокой чувствительности таких соединений к изменению внешних условий: температуры, внешних магнитных и электрических полей, давления.

По сравнению с другими экспериментальными методами, воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого изменения магнитных взаимодействий за счет вариации межатомных расстояний и углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в исследуемых соединениях.

Анализ кристаллической и магнитной структуры манганитов и шпинели проводился методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высоко поточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна), с использованием камеры высокого давления с сапфировыми наковальнями, в диапазоне давлений до 5.7 Гпа и температурном диапазоне 4-424К. Изучались образцы с различными степенями легирования, а также различным размером частиц. Обработка и анализ экспериментальных данных проводились методом Ритвельда с помощью программы FullProf.

Как результат, в соединениях были обнаружены значительные изменения магнитной структуры при высоком давлении, а также предложена структурная модель объясняющая наблюдаемые аномалии. Получены барические зависимости параметров элементарной ячейки и объема, магнитного момента ферромагнитной и антиферромагнитной фазы, рассчитаны температуры Кюри и Нееля.

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

ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ В СОЕДИНЕНИЯХ $Ln_2M_2O_7$ (Ln = La, Pr, Sm, Tb; M-Zr, Hf).

Гайнанов Б.Р.[1], Менушенков А.П.[1], Попов В.В.[1], Зубавичус Я.В.[2]

[1] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: brgaynanov@gmail.com

Целью работы было изучение особенностей локального окружения атомов и кристаллической структуры, а также определение фазового перехода беспорядок-порядок при термическом отжиге. Порошковые образцы были исследованы с использованием методов рентгеновской дифракции и локально-чувствительной рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS). Порошки $Ln_2M_2O_7$ (где Ln=La, Pr, Sm, Tb; M=Zr, Hf) были синтезированы методом обратного соосаждения с последующим их прокаливанием на воздухе в широком диапазоне температур (600 - 1600°C) до получения соответствующих сложных оксидов.

Исследование кристаллической структуры образцов показало, что при температурах отжига до 700°C, большинство указанных соединений находятся в аморфном состоянии с ОКР ~ 1-2 нм. При температурах от 800 до 1000°C наблюдается появление на рентгенограммах пиков, характерных для ГЦК структуры флюоритного типа, дальнейшее повышение температуры отжига приводит к появлению сверхструктурных пиков, свидетельствующих о катионном упорядочении с образованием нанодоменов с пирохлорной структурой в матрице хорошо закристаллизованного флюорита. При этом выявлено, что с уменьшением радиуса катиона РЗЭ увеличивается температура перехода к более упорядоченной структуре пирохлора.

Моделирование EXAFS-спектров позволили уточнить температуру перехода флюорит-пирохлор (от 900°C), сопровождающуюся активной перестройкой локальной структуры и упорядочением атомов в окружении РЗЭ, а также сделать вывод о поведении межатомных связей с повышением температуры отжига. Анализ XANES спектров показал наличие изменения степени окисления катиона Tb^{3+}/Tb^{4+} в порошках $Tb_2Zr_2O_7$ и $Tb_2Hf_2O_7$.

СТРУКТУРА, КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМИЧЕСКОГО ЛИНЕЙНОГО РАСШИРЕНИЯ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ (y=0.0-0.9)

Гильдерман В.К., Антонов Б.Д.

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

e-mail: V.Gilderman@ihte.uran.ru

Легированные хромиты $R_{1-x}Me_xCr_{1-y}Me^I_yO_3$ (R = Nd, Sm, Eu) вполне могут быть использованы в качестве материалов электродов и элементов коммутации высокотемпературных электрохимических устройств с твердым электролитом на основе ZrO_2 [1].

В данной работе исследована структура, коэффициент термического расширения и электропроводность $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ (y=0.0-0.9) на воздухе в температурном интервале 100–1000°C.

Образцы были приготовлены твердофазным синтезом. Однофазность $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ со структурой перовскита сохраняется до Y=0.4. Для составов с Y больше 0,4 чётко прослеживается выделение ещё двух фаз Y_2O_3 и CoO. Параметры решётки *a*, *b*. *c* и V перовскитных фаз $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ уменьшаются с увеличением содержания кобальта до Y=0.4 и далее колеблются в некотором интервале с увеличением Y.

Уменьшение параметров решёток $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ может быть обусловлено как замещением Cr^{3+} на Co^{3+} так и замещением трёхзарядного хрома на Co^{2+} с появлением Cr^{4+}. В первом случае разница между суммами ионных радиусов (по Шеннону [13]) $r(Cr^{3+})+ r(Cr^{3+})$ =0,0615+0,0615=0,123 нм и $r(Cr^{3+})+r(Co^{3+})$ =0,0615+0,0545 =0,116 нм составляет 0,007 нм.

Во втором случае разница между суммами ионных радиусов $r(Cr^{3+})+ r(Cr^{3+})$ =0,0615+0,0615=0,123 нм и $r(Cr^{4+})+ r(Co^{2+})$=0,041+0,065=0,106 нм равна 0,0085 нм. Значения коэффициента линейного термического расширения

$Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ находятся в интервале $(8,77\text{-}16,1)\times10^{-6}$ град$^{-1}$. Некоторые составы имеют значения коэффициентов близкие к КЛТР твердого электролита на основе диоксида циркония для определенного температурного интервала.

Это делает возможным использовать определенные составы в качестве электродных и коммутационных материалов высокотемпературных электрохимических устройств.

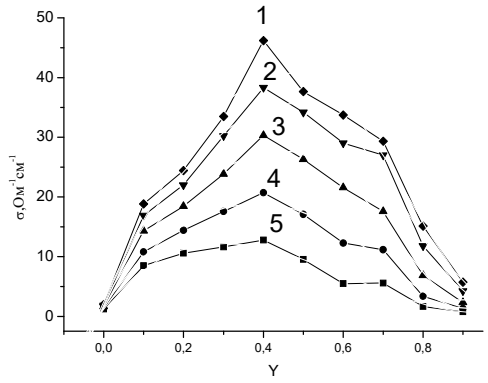


Рис.1. Зависимость электропроводности $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ на воздухе от содержания кобальта при температурах (°C): 1000 (1), 900 (2), 800 (3), 700 (4) и 600 (5).

Из рис. 1 видно, что электропроводность $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$ сначала увеличивается с увеличением Y, достигает максимума при Y=0,4 и далее уменьшается с увеличением содержания кобальта. Максимум электропроводности $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{0,6}Co_{0,4}O_3$ находится на границе однофазности $Y_{0.9}Ca_{0.1}Cr_{1-y}Co_yO_3$. Электропроводность при низких температурах 25-270°C и малом замещении хрома на кобальт обусловлено преимущественно перескоком электронной дырки от Cr^{4+} на Cr^{3+} при высоких температурах 565-1000°C и больших содержаниях кобальта к данному механизму проводимости добавляется механизм проводимости, обусловленный перескоком электронной дырки от Co^{3+} на Co^{2+}

[1] Пальгуев С.Ф., Гильдерман В.К., Земцов В.И. Высокотемпературные оксидные электронные проводники для электрохимических устройств. М.: «Наука». 1990. 198 с.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА С КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИМ НАПОЛНИТЕЛЕМ AL-CU-FE В ПРОЦЕССЕ ТРЕНИЯ

Головкова Е.А., Цетлин М.Б., Теплов А.А., Белоусов С.И., Чвалун С.Н., Голубев Е.К., Пичкур Е.Б.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: eagolovkova@gmail.com

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) (коммерческие названия фторопласт-4, Teflon и др.) широко применяется в качестве матрицы полимерных композитов триботехнического назначения благодаря самому низкому среди полимеров коэффициенту трения. Для повышения износостойкости в ПТФЭ добавляют различные наполнители, например, мел, каолин, асбест. Однако большинство высокодисперсных наполнителей повышают коэффициент трения полимера. Поэтому для антифрикционных применений целесообразно использовать дисперсные наполнители с низким коэффициентом трения.

В связи с этим, в данной работе были получены композиты на основе ПТФЭ с различным содержанием квазикристаллического наполнителя А—Cu-Fe со средним размером частиц 6 мкм и значительной долей частиц субмикронного размера. Проведены исследования структуры композитов методом растровой электронной микроскопии до и после трибологических испытаний.

Коэффициент трения ненаполненного ПТФЭ ниже, чем у композитов с различным содержанием наполнителя, но через 1000 с эксперимента образец полностью истирается. Коэффициент трения композитов медленно возрастает в процессе трения, через 1000 с после начала эксперимента он стабилизируется и достигает величины 0,17 в образце с 1об.% наполнителя. В образцах с 2-16 об.% наполнителя коэффициент трения в установившемся режиме принимает значения ~0.20 Мерой износостойкости рассматривалась относительная потеря массы образца. Добавление 1 об.% квазикристаллического наполнителя уже увеличивает износостойкость примерно в 1800 раз по сравнению с чистым ПТФЭ, а 16 об.% - в 3000 раз.

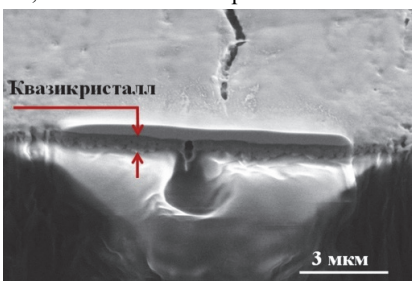


Рис.1 РЭМ-изображение образца после трибологического эксперимента с 1 об. % квазикристаллического наполнителя.

Электронно-микроскопические исследования (рис. 1) в сочетании с энергодисперсионным анализом образцов, подвергавшихся трению, показали, что на поверхности образца образуется корка из квазикристалла толщиной 0.5-1 мкм, содержащая частицы размером 0.2-0.3 мкм, которая, по-видимому, и обеспечивает повышение износостойкости композитов по сравнению с чистым ПТФЭ.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННЫХ TRIP-КОМПОЗИТОВ МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ И МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Горшкова Ю.Е.[1], Гук С.В.[2], Кавалла Р.[2], Бокучава Г.Д.[1], Папушкин И.В.[1]

[1] *Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований*

[2] *Институт обработки металлов давлением, Технический университет Фрайбергская горная академия*

e-mail: gorshk@nf.jinr.ru

С помощью нейтронной дифракции высокого разрешения изучены основные параметры микроструктуры TRIP-композита с аустенитной матрицей и упрочняющей фазой из частично стабилизированного магнием диоксида циркония ZrO_2 (Mg-PSZ) [1, 2], подвергнутого различным степеням пластической деформации (одноосная нагрузка на сжатие). Методом порошковой металлургии с помощью горячего прессования была изготовлена серия образцов композиционного материала с различным содержанием керамической фазы ZrO_2: 0, 10, 20 30 и 100 % (масс.).

В ходе нейтронных экспериментов на дифрактометре ФСД на реакторе ИБР-2 [3, 4] в области пластических деформаций при значениях нагрузки свыше 650 МПа в аустенитной матрице наблюдалось образование двух фаз: кубического α'-мартенсита и гексагонального ε-мартенсита. Содержание ε-мартенсита достигало ~15% для всех образцов при деформировании до σ = 1100 МПа и далее оставалось практически неизменным вплоть до макс. значений нагрузки σ = 1580 МПа. Напротив, фаза α'-мартенсита демонстрировала монотонный рост в диапазоне нагрузок от 950 до 1580 МПа. При этом максимальные значения массовых долей α'-мартенсита зависели от содержания диоксида циркония в композите: $f_{max} \approx 10\%$ для образцов с 0 и 10% ZrO_2, $f_{max} \approx 23\%$ для образца с 20% ZrO_2 и $f_{max} \approx 35\%$ для образца с 30% ZrO_2. В керамическом образце из чистого диоксида циркония (100 % ZrO_2) наблюдались две фазы: кубическая (f ≈ 55%) и тетрагональная (f≈45%). Остаточная деформация кристаллической решетки аустенитной матрицы носит сжимающий характер и увеличивается до $\sim 10^{-3}$. При этом, деформация кристаллической решетки α'- и ε-мартенсита имеет более сложный характер и отражает перераспределение нагрузки между фазами. Кроме того, при деформировании в диапазоне от 650 до 1580 МПа наблюдалось заметное уширение дифракционных пиков, увеличивающееся с ростом пластической деформации материала. Было установлено, что наблюдаемое уширение пиков носит анизотропный характер и обусловлено вариацией фактора контраста дислокаций, плотность которых растет при увеличении пластической деформации. Для аустенитной матрицы из уширений пиков были оценены плотности дислокаций, которые достигают значений в диапазоне $12 \div 20 \cdot 10^{14}$ м$^{-2}$ в зависимости от содержания диоксида циркония в композите.

Дополнительно были проведены эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) на спектрометре ЮМО [5]. Сравнительный анализ кривых МУРН, измеренных до и после деформирования материала, выявил увеличение интенсивности рассеяния для деформированных образцов, что, по всей видимости, связано с образованием мартенситных фаз при пластической деформации материала. Измеренные кривые МУРН были проанализированы с помощью единой глобальной функции рассеяния по всему доступному диапазону переданных импульсов Q, которая представляет собой комбинацию экспоненциальной и степенной частей, соответствующих областям Гинье и Порода, с гладкой переходной областью между ними. Было обнаружено, что в исследуемых материалах наблюдаются два иерархических структурных уровня рассеяния. Первый структурный уровень соответствует рассеянию на основной фазе матрицы и характеризуется радиусом гирации R_g. Второй структурный уровень соответствует рассеянию на компактных неагрегированных субчастицах со своим собственным радиусом гирации R_{gS}.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 15-08-06418_а и № 14-42-03585_р_центр_а). С.Г. и Р.К. выражают благодарность Немецкому Исследовательскому фонду (DFG) за финансовую поддержку особого исследовательского центра 799 (Collaborative Research Center CRC 799) и, в частности, подпроекта A6-I.

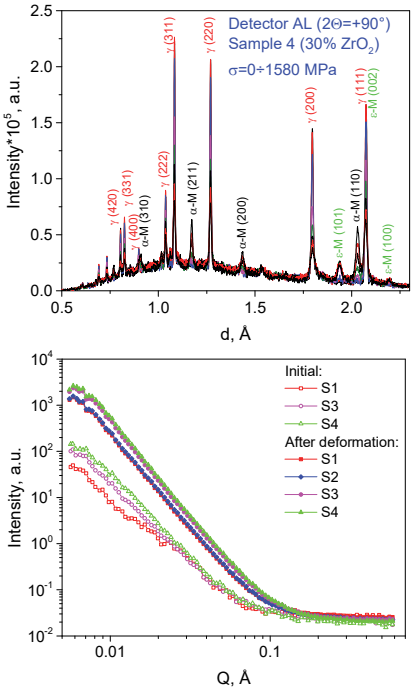


Рис.1. Слева: Изменение в дифракционных спектрах TRIP-композитов в зависимости от величины пластической деформации. Справа: кривые МУРН до и после пластической деформации.

[1] S. Guk, W. Müller, K. Pranke, R. Kawalla // Materials Sciences and Applications, 2014, Vol. 5, pp. 812-822.

[2] S. Guk, K. Pranke, R. Kawalla, Sheet metal products from the TRIP-Matrix-Composite for components, 5th AutoMetForm 2016, June 28th-29th, Wroclaw, Poland.

[3] Г.Д. Бокучава, А.М. Балагуров и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед., 2010, № 11, с. 9-21.

[4] G.D. Bokuchava, I.V. Papushkin et al. // Romanian Journal of Physics, 2016, Vol. 61, No. 3-4, pp. 491-505.

[5] Y.M. Ostanevich // Macromol. Chem. Macromol. Symp., 1988, Vol. 15, p. 91.

ТОНКИЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ SIO2, СОДЕРЖАЩИЕ НАНОЧАСТИЦЫ PT И PD

Губанова Н.Н.[1,2], Шилова О.А.[2], Иванова А.Г.[2], Загребельный О.А.[2], Арсентьев М.Ю.[2], Онущенко П.А.[1,2]
[1] ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт химии силикатов РАН
e-mail: gubnn@lns.pnpi.spb.ru

В последнее время топливные элементы (ТЭ) рассматриваются как реальная альтернатива источникам энергии, работающим на природных ископаемых видах топлива. Сегодня активный интерес вызывают низкотемпературные ТЭ на основе протонпроводящей мембраны, промышленное внедрение которой задерживается из-за высокой стоимости компонентов, таких как платиновый катализатор (платиновая чернь) и мембрана «Нафион» (фирма DuPont). Поэтому целью данной работы явилась разработка альтернативного материала электрода ТЭ, представляющего собой кремнеземную матрицу, с пониженным содержанием Pt и Pt/Pd в виде наночастиц.

В качестве прекурсоров использовали: ТЭОС для формирования кремнеземной матрицы/сетки и $H_2PtCl_6*6H_2O$ и $PdCl_2$ для получения легирующих компонентов. Кремнеземную матрицу, легированную наночастицами Pt и/или Pd, в виде пленки формировали методом центрифугирования с последующей фиксацией при температуре 250 С [1] или «нанесением кистью» на углеродную бумагу. С помощью комплекса взаимодополняющих методов, таких как, рентгеновская рефлектометрия, обратное резерфордовское рассеяние, рентгенофазовый анализ, атомно-силовая микроскопия, оптическая, сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия была изучена структура полученных из них пленок. Также были привлечены методы малоуглового рассеяния рентгена и нейтронов (МУРР и МУРН), которые способствовали определению микро- и мезоструктуры материалов. Каталитическую активность наночастиц платины и/или палладия оценивали с помощью вольтамперометрических характеристик.

Проведенное исследование показало, что с помощью направленного золь-гель синтеза кремнеземных пленок, содержащих наночастицы Pt и Pt/Pd, возможно создание новых материалов для ТЭ обладающих каталитическими свойствами. Также удалось оптимизировать состав и структуру активного слоя, уменьшить содержание металлов за счет его равномерного распределения в матрице в виде наночастиц.

[1] Shilova O.A., Gubanova N.N., Matveev V.A., Bayramukov V.Yu., Kobzev A.P. Composition, structure, and morphology of the surface of nanodimensional platinum-containing films obtained from sols // Glass Phys. Chem, 2016, V. 42, N 1, P. 78-86.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОЭКСТРУЗИОННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ НА МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АЛИФАТИЧЕСКИХ ПОЛИЭФИРОВ

Дунаев А.Г.[1], Джанг Д.С.П.[2], Дженг Дж.Й.[3], Кротова Л.И.[1], Миронов А.В.[1], Миронова О.А.[1], Попов В.К.[1], Чен Ё.Ю.[2]
[1] Институт Фотонных Технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] Национальный университет Формоза
[3] Национальный Тайваньский университет науки и технологии

Разработка тканеинженерных конструкций (ТИК) на основе матричных структур, изготовленных с помощью термоэкструзионной трехмерной печати из биорезорбируемых со-полимеров гомологического ряда алифатических полиэфиров, является одним из перспективных подходов к решению проблем восстановления утраченных или поврежденных фрагментов живых тканей и даже отдельных органов. Однако термомеханическая нагрузка, которой подвергаются исходные полимеры в процессе такой печати, может приводить к значительным изменениям их химического состава и молекулярно-массового распределения (ММР), что, как правило, ведет к непредсказуемости их поведения в биологических средах и организме. В настоящей работе методами гель-проникающей хроматографии и сканирующей электронной микроскопии изучено влияние параметров 3D термоэкструзионной печати на ММР и морфологию поверхности полученных структур на основе триблоксополимеров полиэтиленгликоль/поли-ε-капролактон/полиэтиленгликоля. Полученные результаты позволили наряду с оптимизацией процесса 3D печати биорезорбируемых матриксов, практически полностью исключить термомеханическую деструкцию исходных со-полимеров в процессе их термоэкструзионной переработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 14-02-92010 ННС_а).

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР ZNSE/AL$_2$O$_3$

Иванов М.М., Закирова Р.М., Крылов П.Н., Федотова И.В.
Удмуртский государственный университет
E-mail: fft@udsu.ru

Нанокристаллические материалы обладают неравновесной структурой, незначительные изменения параметров системы могут привести к изменению их свойств. Поиск технологически простых методов создания наноматериалов является актуальной задачей.

Мультислойные наноструктуры ZnSe/Al_2O_3 получены ВЧ магнетронным способом на модернизированной установке “Катод”.

Синтезированы структуры с различными толщинами слоев ZnSe (9, 18, 27, 36, 45 Å), толщина слоев Al_2O_3 была постоянной (7.5 Å), количество пар слоев подбиралось таким образом, чтобы обеспечить приблизительно одинаковую суммарную толщину (0.4 мкм).

Согласно результатам рентгенофазового анализа для мультислойной наноструктуры с толщиной прослойки ZnSe равной 9 Å наблюдаются дифракционные отражения, характерные для оксида алюминия, дифракционные отражения селенида цинка отсутствуют. Для мультислойных структур с толщиной прослойки ZnSe начиная с 18 Å отражения, принадлежащие Al_2O_3, исчезли. Для мультислойных наноструктур ZnSe/Al_2O_3 с большой толщиной прослойки селенида цинка появляются дифракционные отражения, принадлежащие кубическому ZnSe. Размеры области когерентного рассеяния с ростом толщины слоев ZnSe увеличиваются.

Электронно-микроскопические исследования выявили, что структуры с толщинами прослойки ZnSe 9 и 18 Å являются нанокристаллическими (2–8 нм). С увеличением прослойки ZnSe, начиная с толщины слоя ZnSe 27 Å, на кольцах наблюдаются утолщения, свидетельствующие о появлении текстуры. Исследование на просвечивающем электронном микроскопе выявили увеличение размера зерен мультислойных наноструктур ZnSe/Al_2O_3.

Спектры оптического пропускания мультислойных наноструктур ZnSe/Al_2O_3 позволили определить показатель преломления (увеличивается с ростом толщины слоев ZnSe) и ширину запрещенной зоны (увеличивается с уменьшением толщины слоев ZnSe).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ИОНОВ В НАНОЧАСТИЦАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ PbF_2-Cd_xF_2

Иванов–Шиц А.К.[1], Петров А.В.[2], Мурин И.В.[2], Готлиб И.Ю.[2], Саламатов М.С.[2]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *Санкт-Петербургский государственный университет*
e-mail: ivanov@crys.ras.ru

Гетеро- или изовалентные замещениях свинца в матрице β-PbF_2 приводят к существенному увеличению фтор-ионной проводимость нестехиометрических систем. Для твёрдого раствора $Pb_{1-x}Cd_xF_2$ максимальные значения электропроводности достигаются для концентраций около 30 мол.% Cd.

В данной работе метод классической молекулярной динамики был использован для изучения диффузия ионов фтора в сферических наночастицах твёрдых растворов $Pb_{1-x}Cd_xF_2$ с диаметром наночастиц 4 и 10 нм. Выбор параметров потенциалов межатомного взаимодействия контролировался по значениям электропроводности объёмных кристаллов твёрдых растворов $Pb_{1-x}Cd_xF_2$ с максимально адекватным воспроизведением экспериментальных концентрационных зависимостей электропроводности.

С использованием модуля Forcite пакета Materials Studio были рассчитаны среднеквадратичные смещения ионов фтора двух типов – на поверхности и внутри зерен, а также получены радиальные функции распределения ионов в наночастицах (рис.1). На основе этих данных рассчитаны коэффициенты диффузии ионов фтора, находящиеся на поверхности и в объёме наночастиц. Полученные результаты однозначно свидетельствуют о существенном превышении (примерно в 2 раза) коэффициентов диффузии поверхностных ионов по сравнению с ионами в «объеме» наночастицы.

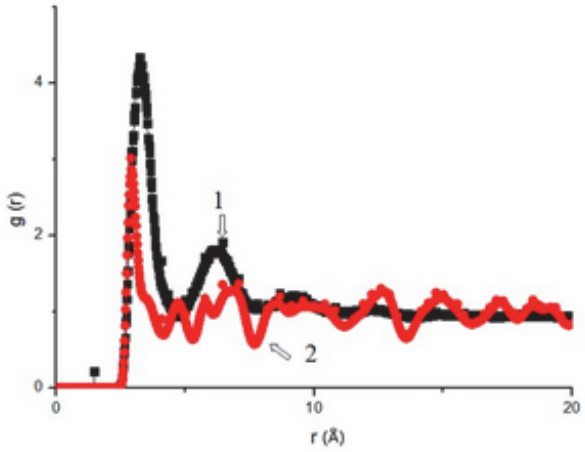


Рис.1. Зависимость RDF для пар F-F для поверхностных ионов в наночастицах $Pb_{0,7}Cd_{0,3}F_2$ (1) и для ионов в твёрдом растворе $Pb_{0,7}Cd_{0,3}F_2$ (2).

Компьютерные расчеты были проведены с использованием вычислительных ресурсов «Вычислительного центра СПбГУ» (http://cc.spbu.ru).

Работа поддержана грантом РФФИ №14-03-01051.

МОРФОЛОГИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ AgI В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Иванов–Шиц А.К.[1], Петров А.В.[2], Мурин И.В.[2], Готлиб И.Ю.[2]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] Санкт-Петербургский государственный университет

e-mail: ivanov@crys.ras.ru

Внедрённые в углеродные нанотрубки твёрдые электролиты представляют собой новый класс композиционных материалов. Исследование взаимовлияния электронной структуры углеродной нанотрубки и характеристик ионного связывания во внедренной неорганической наноразмерной фазе также объединяет в себе фундаментальную составляющую (в частности, изучение особенностей совместного ионно-электронного транспорта) и прикладные аспекты, связанные с созданием новых электродных материалов.

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование композиционных материалов на основе AgI и углеродных нанотрубок (AgI- Si_3O_6@SWNT). Модельная система создавалась из углеродной нанотрубки (12,12), в которую вводились катионы серебра и анионы иода, а сформированные нанокластеры оксида Si_3O_6. На первом этапе атомные заряды были рассчитаны методом DFT с функционалом PBE;а МД-расчеты проводились с использованием программного пакета Materials Studio.

Было показано, что введение кластеров Si_3O_6 приводит к изменению как коэффициентов диффузии ионов серебра, так и морфологии твердого электролита внутри нанотрубки. Было изучено влияние типа нанокластеров Si_3O_6 – линейных или циклических, на диффузию ионов серебра определены зависимости межатомных расстояний в композите AgI-SiO_2, находящемуся внутри углеродной нанотрубки от типа наночастиц Si_3O_6.

Расчеты были проведены с использованием вычислительных мощностей Ресурсного Центра «Вычислительный центр СПбГУ» (http://cc.spbu.ru).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-03-01051

ФАЗООБРАЗОВАНИЕ, СТРУКТУРА, МИКРОСТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КЕРАМИКИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГАЛЛАТА ЛАНТАНА

Калева Г.М., Сухарева И.П., Мосунов А.В., Садовская Н.В., Политова Е.Д.

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова

e-mail: kaleva@nifhi.ru

Гетерозамещенный галлат лантана $La_{0.9}Sr_{0.1}Ga_{0.8}Mg_{0.2}O_{3-y}$ является перспективным альтернативным материалом электролита для твердооксидных топливных элементов, функционирующих в области промежуточных температур, ввиду его высокой ионной проводимости в широком диапазоне парциальных давлений кислорода и незначительной электронной проводимости. Одним из эффективных подходов к оптимизации функциональных характеристик керамических материалов является гетеровалентное замещение катионов в базовом составе.

В данной работе методом твердофазного синтеза получены керамические образцы в системе $(La_{0.8}Sr_{0.2})\{[Ga_{0.8-x}(Si_{0.5}Mg_{0.5})_x]Mg_{0.2}\}O_{3-d}$ (x=0÷0.8) и изучены их фазообразование, структура, микроструктура и электропроводность.

Установлено формирование фазы со структурой перовскита в образцах с x=0÷0.6. Указанные составы характеризуются ромбической структурой (пространственная группа Pbnm). Фрагменты дифрактограмм образцов с замещением части катионов галлия на катионы кремния и магния демонстрируют последовательное смещение дифракционных пиков в область меньших углов, что указывает на небольшое увеличение параметров элементарной ячейки в результате замещения катионов Ga на катионы Si и Mg.

Выявлено, что керамика характеризуется однородной микроструктурой с зернами квадратной формы размерами (10x10) мкм с проявлением эффекта подплавления границ зерен, что отражает факт жидкофазного механизма спекания в процессе высокотемпературной обработки. Изучены температурные зависимости полной электропроводности синтезированных керамических образцов и подтверждены ее высокие значения в области температур вблизи 1000 К.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 16-03-00581).

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛЕГИРОВАННЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ NI3AL

Коммель Л[1], Кодесс Б.Н.[2], Коммель И.[2]
[1]Таллинский технологический университет,
[2]ФГУП «ВНИИМС», Росстандарт

Проведены электронно-микроскопические и рентгеновские исследования на срезах и сферических монокристаллах легированного алюминида никеля с различными параметрами кристаллизации и с различным уровнем последующей нагрузки. Важной особенностью этих сплавов является сосуществование двух фаз гамма/гамма штрих, соотношение которых определяет функционально полезные характеристики. Это соотношение, а также заселенности позиций в элементарных ячейках различными элементами было определено по данным высокоточных экспериментов (4-х кружный монокристальный дифрактометр Xcalibur с MoKα излучение, несколько тысяч отражений в полной сфере Эвальда). Параметры решетки уточнялись по высокоугловым данным. На исходных образцах и после различной циклической нагрузки найдено изменение уширения брэгговских отражений, возникающее за счет увеличения уровня микронапряжений. Микромеханические свойства определены после циклической нагрузки с различными дозами, используя данные наноидентирования. Результаты рентгеновских и электронно-микроскопических исследований показывают, что соотношение гамма/гамма штрих фаз становится более однородным и изменяется после деформации. Рентгеновский микроанализ показывает, что этот процесс может происходить в результате междиффузионных процессов. Электронно-микроскопические данные показывают, что в исходных монокристаллах нет дефектов на границах блоков мозаики. После деформации появляются микропоры и число дефектов заметно возрастает.

СТРУКТУРНЫЕ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТО- И АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК АМИНОКИСЛОТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Кричевцов Б.Б., Балашова Е.В. , Свинарев Ф.Б., Зайцева Н.В.
ФГБУН Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе РАН
e-mail:balashova@mail.ioffe.ru

Недавно было показано, что пленки сегнето- и антисегнетоэлектрических соединений аминокислот (глицин, бетаин, саркозин) и неорганических кислот (H_3PO_3, H_3AsO_4, H_3PO_4, H_2SO_4) или солей, могут быть приготовлены на различных подложках [1-4]. В докладе представлен обзор работ, посвященных особенностям роста и стабильности пленок, исследованию их структурных и диэлектрических свойств, а также изучению процессов переключения поляризации, проведенных в ФТИ им. А.Ф. Иоффе в последние годы.

Тонкие сегнетоэлектрические пленки бетаинфосфита, глицинфосфита, бетаинарсената, их дейтерированных аналогов, а также антисегнетоэлектрические пленки дейтерированного бетаинфосфата, были выращены из водных растворов соответствующих объемных кристаллов. Рентгендифракционные исследования показали, что пленки бетаинфосфита, глицинфосфита и бетаинарсената имеют текстуру с ориентацией полярной оси в плоскости пленки (*рис.1).* Приводятся результаты исследования слабо- и сильносигнального диэлектрического отклика, влияния изотопического эффекта, диэлектрической нелинейности. Обсуждается механизм переключения поляризации в сегнетоэлектрических пленках с различными размерами монокристаллических блоков. Приводятся результаты теоретического рассмотрения, полученные в рамках термодинамической модели со связанными параметрами порядка.

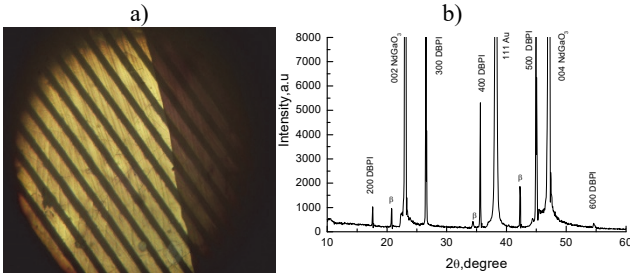


Рис.1. (a) Изображение двухблочной пленки дейтерированного бетаинфосфита (DBPI) в поляризационном микроскопе. Полосовая структура - система электродов. (b) Дифрактограмма пленки DBPI.

Работа выполнкна при частичной поддержке РФФИ (проект № 16-02-00399).

[1]. E.V. Balashova, B.B. Krichevtsov, V.V. Lemanov// J.Appl.Phys., 2008, V.104**,** p.126104.

[2]. Е.В. Балашова, Б.Б. Кричевцов, В.В. Леманов// ФТТ, 2009, т. 51, с. 560-567.

[3]. E.V. Balashova, B.B. Krichevtsov//"Ferroelectrics-Material Aspects", Ed. by M. Lallart (InTech, 2011), pp. 445-478.

[4]. E.V. Balashova, B.B. Krichevtsov// Ferroelectrics, 2014, V.469, pp. 26-42.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ $LaNbO_4$

Левина А.А.[1], Богдан Н.О.[1], Каймиева О.С.[1], Петрова С.А.[1, 2]

[1] *Уральский федеральный университет*

[2] *Институт металлургии УрО РАН*

e-mail: la34370@yandex.ru

Ортониобаты редкоземельных элементов (Ln) обладают высокой ионной проводимостью и химической устойчивостью при высоких температурах, благодаря чему вызывают большой интерес в сфере материаловедения как материалы для различных электрохимических устройств. Данные соединения кристаллизуются в тетрагональной сингонии, структура шеелита при высоких температурах, и в моноклинной сингонии, структура фергусонита при низких температурах. Полиморфный переход осуществляется при преодолении температурного порога T~800 K (так для соединений на основе ниобата лантана температура перехода варьируется от 760 до 820 K в зависимости от способа синтеза).

В связи с этим в работе поставлены задачи: синтез ниобатов лантана, замещенных Bi и W, аттестация сложнооксидных соединений методом РФА, установление структурных особенностей полученных соединений.

Для серии $La_{1-x}Bi_xNbO_4$ (x=0.1-0.9) образуются твердые растворы на основе либо ниобата лантана $LaNbO_4$, либо ниобата висмута $BiNbO_4$. Область существования моноклинной модификации $La_{1-x}Bi_xNbO_4$ ограничена составом с x=0.3 (пр. гр. $I2/b$), триклинная модификация (на основе ниобата висмута) существует в диапазоне $0.775 \le x \le 0.9$ (пр. гр. P-1). В средней области концентраций обе фазы присутствуют совместно.

Образцы в серии $LaNb_{1-y}WyO_4$ (y=0.1-0.3) во всей изученной концентрационной области однофазны. При y=0.0-0.15 образуется моноклинная модификация (пр. гр. $I2/b$). При увеличении содержания вольфрама до y=0.2-0.3 твердые растворы кристаллизуются в орторомбической сингонии (пр.гр. $Ima2$). У большинства образцов обнаружены дополнительные рефлексы, появление которых может быть результатом формирования несоразмерно модулированной структуры (рис.1).

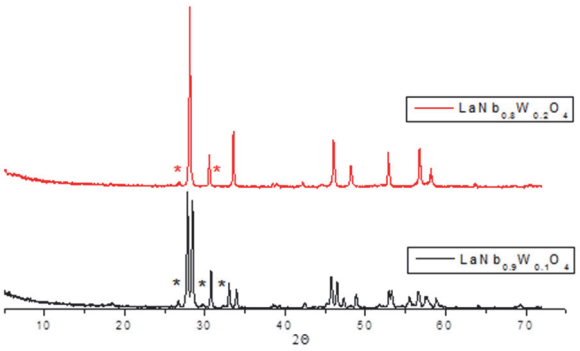


Рис. 1. Дифрактограммы образцов состава $LaNb_{1-y}W_yO_4$ (звездочками отмечены сверхструктурные линии)

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МАГНИЙ-ЦИНК-КАЛЬЦИЕВЫХ ТИТАНАТОВ

Летко А.К.[1], Савчук Г.К.[2]

[1]*ГНПО "Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению"*

[2] *Белорусский национальный технический университет*

e-mail: letko@physics.by

Создание новых керамических материалов является приоритетным направлением, так как материалы определяют дальнейшее развитие таких отраслей, как вычислительная техника, радиотехника, техника сверхвысоких частот (СВЧ), автоматика, радиолокация, спутниковая связь, навигация и др. Материалы для СВЧ-конденсаторов должны обладать повышенной относительной диэлектрической проницаемостьюε; близким к нулю температурным коэффициентом диэлектрической проницаемости TK_ε, не вызывающим заметного изменения электроемкости при повышении температур; малыми диэлектрическими потерями. Наряду с перечисленными требованиями, материалы должны иметь широкий диапазон значений ε, а также высокую стабильность диэлектрических свойств в рабочих диапазонах температур и частот конденсатора.

При разработке материалов с минимальным температурным коэффициентом диэлектрической проницаемости, необходимо учитывать факторы, влияющие на TK_ε. Этими факторами являются состав и свойства основных кристаллических фаз, которые образуют твердые растворы внедрения или замещения. Известно [1-2], что в качестве основных компонентов для керамических СВЧ-диэлектриков используются соединения с упругой поляризацией (электронной и ионной). К таким соединениям, обладающим сравнительно высокой диэлектрической проницаемостью (от 80 до 180), относятся титаносодержащие соединения: TiO_2, $CaTiO_3$ (CT), $SrTiO_3$, $MgTiO_3$.

СВЧ-керамические материалы могут представлять собой как бинарные, так и более сложные твердые растворы или механические смеси соединений с различными значениями ε и TK_ε. При использовании соединений, входящих в состав керамики, с температурными коэффициентами диэлектрической проницаемости противоположных знаков (для электронной поляризации TK_ε<0, для ионной поляризации TK_ε>0) можно получить требуемую температурную стабильность электроемкости и диэлектрических свойств.

Целью данной работы являлось изучение условий получения и физических свойств керамических СВЧ-материалов на основе системы $(1-x)((Mg_{0,2}Zn_{0,8})$-Ti-O)-$x$$CaTiO_3$. Разработка конденсаторных материалов основывалась на том, что матрицу составов должно составлять соединение или твердый раствор с низкими диэлектрическими потерями. Для получения керамик использовались два метода. В первом методе синтез порошков системы $(1-x)((Mg_{0,2}Zn_{0,8})$-Ti-O)-$x$$CaTiO_3$ ($(1-x)$(MZT)-xCT) осуществлялся из оксидов магния MgO и цинка ZnO, диоксида титана TiO_2 и аксалата кальция $CaCO_3$. Во втором методе получения ($(1-x)$(MZT)-xCT) материала

производился синтез соединений $CaTiO_3$ и $(Mg_{0,2}Zn_{0,8})TiO_3$. Синтезированные порошки измельчались, смешивались со связкой, прессовались в диски □8-12 мм и спекались. Полученные керамические образцы исследовались.

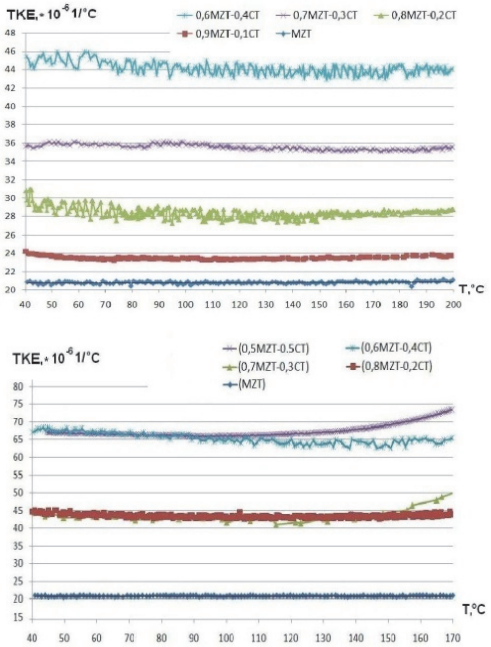


Рис.1.Температурные зависимости TK_ε керамик, полученных по первому(а) и второму (б) методам

Керамические материалы состава (1-*x*)(MZT)-*x*CT, полученные при различном содержании титаната кальция, термостабильны в рабочем интервале температур (20-200ºС). Наибольшей температурной стабильностью диэлектрической проницаемости в диапазоне температур 30-450ºС и TK_ε в интервале температур 20-200ºС (рис. 1*а*), обладают керамики состава 0,7MZT-0,3CT. Проведенные исследования показали, что изменение содержания CT в системе на основе титаната цинка-магния при первом способе получения способствует увеличению плотности и росту зерен керамических образцов. Диэлектрическая проницаемость ε (при T = 20ºС на частоте 1 МГц) при увеличении содержания $CaTiO_3$ изменяется от 19 до 42. Керамические образцы состава (1-*x*)(MZT)-*x*CT имеют наиболее низкие диэлектрические потери tgδ=0,0065 и более высокую диэлектрическую проницаемость при *x*=0,3. TK_ε при этом составляет $36\cdot10^{-6}1/^0C$.

Для керамик системы (1-*x*)((Mg$_{0,2}$Zn$_{0,8}$)-Ti-O)-*x*$CaTiO_3$, полученных по второму методу, значения диэлектрической проницаемости ε в зависимости от концентрации CT изменяются от 30 до 85. Низкие значения тангенса диэлектрических потерь 0,45%, диэлектрическую проницаемость < 80 и высокую температурную стабильность TK_ε ($65\cdot10^{-6}1/^0C$) в рабочем диапазоне температур имеет керамика состава 0,6MZT-0,4CT. Характеристики СВЧ-керамики указанного состава делают ее весьма перспективной для изготовления конденсаторов СВЧ-диапазона.

[1] Б.А. Ротенберг. М.: ОАО НИИ «Гириконд», 2000, 239с.

[2] П.М. Плетнев, И.И. Рогов. Вестник Сибирского государственного университета путей сообщения, №17, С. 232-244, (2007).

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ НА ГРАНИЦУ РАЗДЕЛА ФАЗ И НА КАЧЕСТВО КРИСТАЛЛОВ, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

Матросов В.Н.

Белорусский национальный технический университет

e-mail: info@solix-crystal.com

При выращивании кристаллов методом Чохральского кристалл формируется на границе раздела трех фаз – жидкой, твердой и газообразной, которая называется фронтом кристаллизации (ФК). ФК является показателем тепловых условий, которые созданы в тигле и надтигельном пространстве. Важнейшей характеристикой ФК является его форма, которая задается кинетическими и тепловыми условиями, а также зависит от ориентации затравки и структуры кристалла. От формы ФК зависят коэффициенты распределения примесей в кристалле, его механические и оптические свойства.

Постановка задачи.

Целью работы являлась разработка способа управления формой ФК. А также рассмотрение зависимости ФК и качества кристаллов от технологических условий.

Основные результаты.

Для управления ФК была разработана программа автоматического контроля за его формой, которая позволила поддерживать заданную форму на протяжении всего процесса выращивания кристаллов.

В качестве датчиков использовались: весовая система с чувствительностью, равной 10 миллиграммам, катушки отбора мощности и датчик скорости перемещения штока. Сигналы с этих датчиков поступали в систему автоматического управления, там они обрабатывались, сравнивались с заданием, в результате чего формировались команды, воздействующие на мощность генератора (температуру расплава) и скорость вращения кристалла.

Разработанная программа учитывала левитацию и силу поверхностного натяжения расплава.

В автоматическом режиме выращивания кристаллов система следила и управляла: углом разращивания кристалла, радиусом кристалла, второй производной приращения веса по времени.

В докладе подробно рассмотрены вопросы влияния температуры охлаждающей воды, колебаний напряжения питающей сети, нестабильности систем вращения и вытягивания на ФК и качество получаемых кристаллов.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ $ZnAl_2O_4$ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ МЕТОДА СИНТЕЗА

Подсыпанина Н.С., Лебедев Л.А., Сычев М.М.
Санкт – Петербургский Государственный Технологический институт (Технический университет)
Email: podsypaninanataly@gmail.com

FED одна из дисплейных технологий, которая позволяет получать плоские экраны с большой диагональю. Особенностью таких экранов является низкое энергопотребление, широкий угол обзора, качество изображения и высокое время отклика [1]. В основе таких дисплеев лежит принцип ЭЛТ. В отличие от обычного кинескопа каждому пикселю соответствует электронный эмиттер, отдельный для каждого из трех цветов — красного, зелёного, синего. Люминофор $ZnAl_2O_4:Eu^{3+}$может быть использован в качестве красного пикселя.

В ходе работы образы синтезированы двумя методами: самораспространяющимся высокотемпературным (СВС) и золь-гель методами. Было синтезировано 2 серии образцов с варьированием параметров синтеза (время отжига, температура отжига, введение различного количества примесей). Образцы исследовались методами рентгенофазового анализа и измерены спектрально-яркостные характеристики.

По результатам работы можно заключить, что все образцы соответствует структуре цинк алюминатной шпинели. Однако, образцы, полученные СВС методом, имеют примесную фазу, для удаления данной фазы керамические порошки $ZnAl_2O_4$ отжигались при T=1000˚C в течении 8 часов. Спектры фотолюминесценции так же зависят от структуры и метода синтеза. Сравнивая яркости образцов можно сделать вывод, что образцы, полученные золь-гель методикой, будут ярче. Это может быть объяснено присутствием дополнительной фазы в образцах, полученных методом СВС. Его содержание увеличивается пропорционально концентрации легирующей примеси, это приводит к тому, что часть ионов примеси не встраивается в матрицу.

[1] Chong Peng, Guogang Li , Dongling Geng, Mengmeng Shang , Zhiyao Hou , Jun Lin. Fabrication and luminescence properties of one-dimensional $ZnAl_2O_4$ and $ZnAl_2O_4$: A^{3+} (A = Cr, Eu, Tb) microfibers by electrospinning method. Materials Research Bulletin.2012. 3592–3599

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И ЛОКАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ ПОРОШКОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ «ZrO_2 - Ce_2O_3/CeO_2»

Попов В.В.[1], Менушенков А.П.[1], Хубутдинов Р.М.[1], Зубавичус Я.В.[2], Светогоров Р.Д.[2], Шарапов А.С.[1], Курилкин В.В.[3]
[1] *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт»*
[3] *Российский университет дружбы народов*
e-mail: RusHub92@gmail.com

Методами рентгеновской дифракции, рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS), спектроскопии комбинационного рассеяния и термогравиметрического анализа проведено исследование влияния условий синтеза (тип атмосферы, вид восстановителя, температура отжига и восстановления) на химический состав и структуру соединений, образующихся в системе “ZrO_2 - Ce_2O_3/CeO_2”, синтезированных методом соосаждения с последующим прокаливанием смешанных гидроксидов (прекурсоров).

Установлено, что изотермический отжиг прекурсоров на воздухе в интервале температур 600-900ºC приводит к образованию порошков $Ce_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ с кубической структурой флюоритного типа (*Fm-3m*). Дальнейшее повышение температуры ≥ 1000ºC вызывает распад образовавшейся кристаллической структуры на две фазы: кубическую $Ce_{0.55\text{-}0.6}Zr_{0.4\text{-}0.45}O_2$ и тетрагональную $Ce_{0.07}Zr_{0.93}O_2$. При этом наиболее резкое изменение параметров локальной структуры наблюдается в области температур 1100-1200ºC. Обнаружено, что отжиг образцов в восстановительной атмосфере приводит к образованию соединений с промежуточной валентностью церия состава $Ce^{4+}_{2x}Ce^{3+}_{2\text{-}2x}Zr_2O_{7+x}$, где величина ($x$) зависит как от условий восстановления, так и параметров предварительной теромобработки прекурсора. Обнаружена хорошая корреляция между составом порошков, определенным методами термогравиметрии и XANES. Показано, что восстановление в вакууме при 1400ºC позволяет получить порошок с максимальным содержанием Ce^{3+}, имеющим структуру пирохлора (*Fd-3m*). Дальнейшее старение на воздухе приводит к увеличению содержания Ce^{4+} и появлению моноклинной фазы.

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ ЭЛЕКТРОННОМИКРОСКОПИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В ИССЛЕДОВАНИИ ФАЗОВОЙ СТРУКТУРЫ И МОРФОЛОГИИ НАНОКОМПОЗИТА СИСТЕМЫ PdCu/Al_2O_3

Пресняков М.Ю.[1], Белоногов Е.К.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Воронежский государственный университет
e-mail: mpresniakov@gmail.com

Объектами исследований в данной работе служат образцы гетероструктур PdCu/Al2O3, которые созданы магнетронным распылением и конденсацией в вакууме сплава PdCu на поверхность керамики Al2O3 с открытой сквозной пористостью [1]. Были проведены комплексные электронномикроскопические исследования гетероструктуры системы PdCu/Al2O3 и установлены закономерности формирования структуры, фазового и химического состава селективных мембранных элементов для высокоэффективных фильтров глубокой очистки водорода.

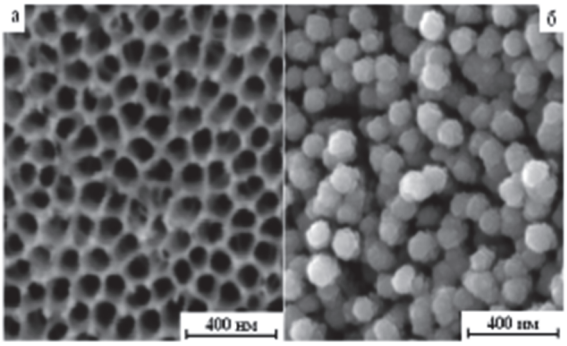


Рис.1. РЭМ- изображения исходной поверхности Al2O3 (а) и фронта роста PdCu при Tn=300K и ωк = 0.2 нм/с (б)

Результатом данной работы стало более глубокое понимание физико-технологических принципов синтеза инновационной металлокерамической гетероструктуры PdCu\Al2O3 для высокотемпературных водородных энергетических систем, и отработка последовательности методик [2] контроля процесса синтеза гетероструктуры PdCu\Al2O3. Получены новые данные о закономерностях формирования рельефа и субструктуры конденсированных слоев PdCu. Установлены технологические факторы, определяющие степень заполнения открытой пористости оксида алюминия в процессе конденсации металла. Определена зависимость параметров нанорельефа поверхности PdCu от условий магнетронного распыления и конденсации [3] в гетероструктуре PdCu/Al2O3. Работа частично выполнена на оборудовании РЦ ЗЭМ КК НБИКС-технологий НИЦ “Курчатовский институт при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках гранта 16-38-50029 мол_нр.

[1] Иевлев В.М..и др., Доклады Академии наук. 2015. Т. 460. № 4. С. 422

[2] Пресняков М.Ю., Попов А.И. и др., Российские нанотехнологии. Т 9, №7-8, 2014, СС. 59-70

[3] Иевлев В.М и др., Доклады Академии наук. 2014. Т. 457. № 6. С. 676

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИМЕР-ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА В СРЕДЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

Пудовкина Г.И.[1], Чурбанов С.Н.[1], Акованцева А.А.[1], Тимашев П.С.[1], Баграташвили В.Н.[1], Бузник В.М.[2]
[1] Институт фотонных технологий « ФНИЦ Кристаллография и фотоника РАН»
[2] Института металлургии и материаловедения им А.А. Байкова РАН
e-mail pudovkina.il.galina@gmail.com

В течение последних трех десятилетий сверхкритический диоксид углерода ($скCO_2$) все чаще используется в качестве транспортной среды, а также реакционной смеси для полимеризации и пластификации различных химических соединений из-за своей привлекательности как с экономической, так и с экологической точек зрения [1]. Пластификация в среде $скCO_2$ используется для импрегнации полимеров низкомолекулярными веществами с целью создания новых композиционных материалов [2-3]. Использование среды скCO2 позволяет значительно упростить сам процесс формирования композитного материала и формировать материалы на основе термодинамически не совмещаемых полимеров, структурно однородные на микро и макро уровне [4].

Целью настоящей работы явилась разработка формирования композитного материала, обладающего повышенными прочностными свойствами, при проведении сополимеризации метилметакрилата в присутствии сшивающих агентов в матрице вспененного политетрафторэтилена (ПТФЭ) в среде скCO2. Выбор вспененного ПТФЭ был обусловлен его устойчивостью к воздействию температуры, низким коэффициентом трения, а также исключительной химической инертностью и термической стойкостью, превосходящей многие природные и синтетические пластики [5].

Были получены образцы пленок на основе ПТФЭ в присутствии полиэтиленгликоля диакрилата (ПЭГДА) и этиленгликоля диметакрилата (ЭГДМА). Проведена оценка механических свойств от содержания сшивающих агентов. Показано, что максимальная механическая прочность достигается при содержании 10 мас.% ЭГДМА и предварительной опрессовке пленки ПТФЭ.

[1] Quinn E.L., Jones C.L. // Carbon Dioxide. New York: Reinhold, 1936, p. 283

[2] Watkins J.J., McCarty T.J.// Marcomolecules, 1994, v.27, p. 4845

[3] Watkins J.J., McCarty T.J.// Marcomolecules, 1995, v.28, p. 4067

[4] Popov V.K., Bagratashvili V.N., Krasnov A.P., Said-Galiev E.E., Nikitin L.N., Afonicheva O.V., Aliev A.D..// Tribology Letters, 1998, v.5, p.297

[5] Щеглов П.П., Иванников В.Л. // Пожароопасность полимерных материалов. М.: Стройиздат, 1992, с.110

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛЕНОК ОКСИДА ВОЛЬФРАМА ДЛЯ ЭФФЕКТИВНЫХ ДАТЧИКОВ ВОДОРОДА НА КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

Соловьев А.А., Зуев В.В., Фоминский В.Ю.
НИЯУ МИФИ
e-mail:ale7@inbox.lv

Исследованы зависимости газосенсорных свойств датчиков водорода на платформе металл–металлооксид–6H-SiC от структурных характеристик металлооксидного тонкопленочного газочувствительно слоя, который создавался из триоксида вольфрама. Пленки WO_3 наносились методом реактивного импульсного лазерного осаждения. Использование низкого давления кислорода (до 10 Па) обеспечивало формирование плотной пленки, однако характер термо-актвивированных структурных изменений при отжиге (550°C) зависел от скорости осаждения пленки. Получены пленки толщиной несколько сот нанометров, имеющие моноклинную и ромбическую решетку. Реакции на водород исследовались регистрацией изменений электрофизических характеристик при расположении токовых электродов со стороны пленки и карбидокремниевой подложки. Информация о структурном состоянии пленок получена методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии.

Установлено, что применение пленок с моноклинной решеткой обеспечивает высокий отклик на водород, однако он достигается только при нанесении тонкого каталитического слоя из платины. Такой датчик может функционировать при минимальных энергозатратах, если регистрацию водорода проводить на обратной ветви вольтамперной зависимости. Пленки, имеющие ромбическую решетку, обеспечивали возможность регистрации относительно малых концентраций водорода без применения платинового слоя. При этом отсутствие пленки Pt обеспечило ускоренную реакцию на водород и снизило время на восстановление датчика после удаления водорода. Кроме типа решетки эти пленки обладали рядом других структурных особенностей, которые могли повлиять на их газосенсорные свойства. Такие факторы, как слоистая упаковка кристаллитов и наличие микропор, могли оказать существенное влияние на транспорт водорода в этих пленках.

СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА В ОБОЛОЧКАХ МИКРОКАПСУЛ ПО ДАННЫМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Старчиков С.С.[1], Букреева Т.В.[1], Lin C.R.[2], Гервиц Н.Е.[1], Дмитриева Т.В.[1], Любутин И.С.[1]
[1]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2]Department of Applied Physics, National Pingtung University
e-mail: sergey.s.starchikov@gmail.com

Сейчас большое внимание уделяется изучению свойств магнитных наночастиц и нанокомпозитов перспективных для биомедицинских применений. Такие наночастицы широко применяются в адресной доставке лекарств,[1] при лечении методом гипертермии, магнитной резонансной томографии, а также в микроэлектронике, оптоэлектронике, солнечной энергетике и др. В данной работе изучались магнитные свойства наночастиц γ-Fe2O3/Fe3O4, синтезированных *in situ* в оболочках полимерных микрокапсул, которые перспективны для адресной доставки лекарств. Был использован комплекс методов, таких как порошковая рентгеновская дифракция, просвечивающая и сканирующая электронная микроскопия, рамановская и мёссбауэровская спектроскопия. Установлено, что микрокапсулы имеют средний размер 6.7 мкм, при средней толщине оболочки 0.9 мкм. Наночастицы оксида железа близки к монодисперсным со средним размером 7.5 нм, и в основном находятся в оболочках капсул. Установлено, что при таком синтезе основной фазой является γ-Fe2O3, и наночастицы находятся в суперпарамагнитном состоянии вплоть до комнатной температуры. Это, во-первых, позволяет с помощью магнитного поля управлять доставкой микрокапсул в нужное место живого организма, а во-вторых, суперпарамагнетизм препятствует агрегированию магнитных наночастиц, что облегчает их вывод из организма после использования. Таким образом, полученные микрокапсулы могут найти применение в медицине для адресной доставки лекарств. Кроме того, были приготовлены полимерные микросферы, на поверхности которых были синтезированы композиты SiO2 / CoFe2O4. Установлено, что размер и магнитные свойства наночастиц CoFe2O4 можно контролировать на стадии отжига. Данные мёссбауэровских и магнитных измерений указывают, что образцы могут проявлять ферромагнитные и суперпарамагнитные свойства при комнатной температуре в зависимости от размера частиц.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (Грант #14-12-00848).

[1] I.S. Lyubutin, S.S. Starchikov, T.V. Bukreeva, et al., // J. Mater. Sc & Eng C, 2014, 45, 225

ПРИМЕНЕНИЕ ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ СОДЕРЖАЩИХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫЕ НАНОГЛИНЫ

Столярова Д.Ю.[1], Белоусов С.И.[1,3], Чвалун С.Н.[1,2]
[1]НИЦ «Курчатовский институт»
[2]ИСПМ им.Ениколопова РАН
[3]НИФХИ им.Л.Я.Карпова
e-mail: stolyarova.d@gmail.com

Электрореологические (ЭР) жидкости относятся к классу, так называемых, «умных» материалов, реологические и механические свойства которых (вязкость, предел текучести, модуль сдвига и др.) изменяются при наложении внешнего электрического поля (ЭП), что открывает широкие возможности технологического применения оных в электронике, робототехнике и конструкторском деле.

Предметом исследования служили образцы исходных и органомодифицированных монтмориллонитовых наноглин (ММТ), характеризующихся различным межплоскостным расстоянием, в полидиметилсилоксановом масле. Варьировали концентрацию ММТ и содержание воды в дисперсной фазе. Для описания структурных особенностей строения суспензий использовали Курчатовский источник синхротронного излучения. Методом ротационной вискозиметрии с приставкой высокого напряжения изучали ЭР свойства жидкостей.

В работе обсуждаются и сравниваются структурные особенности полученных суспензий. Показано влияние органических модификаторов и содержания влаги в ММТ на степень интеркаляции и эксфолиацию в ЭР жидкостях. Проведен анализ механизма проявления ЭР эффекта в исследованных системах. Предложено использовать в качестве оценки меры эксфолиации отношение интегральной интенсивности малоугловых рефлексов рассеяния к пикам больших углов. Показано, что под действием ЭП у всех образцов суспензий резко увеличиваются пределы текучести, при этом наблюдается незначительное увеличение Бингамовской вязкости. Кривые течения описываются уравнением Бингама. Обнаружено, что ЭР отклик в суспензиях с равновесным содержанием воды в дисперсной фазе, существенно выше, чем в образцах, включающих сушеный ММТ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 15-03-01121 А.

РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПОСЛЕ МЕХАНОХИМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Сухарина Г.Б.[1], Смоленцев Н.Ю.[1], Абдулвахидов Б.К.[1],
Сташенко В.В.[2], Сирота М.А.[1], Гуда А.А.[3],
Бугаев Л.А.[1],Абдулвахидов К.Г[3], Солдатов А.В.[3]
[1]Южный Федеральный университет, физический факультет
[2]НИИ физики ЮФУ
[3]МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ
e-mail: galina_sukharina@mail.ru

Изучение структуры сегнетоэлектрических материалов является актуальной проблемой, имеющей важное значение для создания функциональных материалов с заданными свойствами. В данной работе выполнена отладка методики синтеза сегнетоэлектрических материалов на основе механохимии и механоактивации, на примере соединений $PbSc_{0.5}Ta_{0.5}O_3$, $PbTa_{0.5}Mn_{0.5}O_3$ и $PbFe_{0.5}Ta_{0.5}O_3$. Методы синтеза на основе механохимии и механоактивации, позволяющие влиять на концентрацию и тип структурных дефектов представляют большой интерес, как один из возможных способов управления физическими свойствами [1].

Для определения структурных перестроек и выяснения природы изменения физических свойств наноструктурированных сегнетоэлектрических материалов после механохимического воздействия, измерены L_3 XANES спектры тантала для исходных образцов и образцов, подверженных интенсивному силовому воздействию.

На основе многомасштабного компьютерного моделирования с использованием полуэмпирических квантово-химических подходов и «ab-initio» расчетов L_3 XANES спектров для различных моделей ближнего окружения тантала изучаемых материалов определены изменения атомной и электронной структуры после интенсивного силового воздействия. Полученные результаты позволят перейти к определению фундаментальных закономерностей взаимосвязи локальной атомной и электронной структуры сегнетоэлектрических материалов и наблюдаемых физических свойств после механоактивации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-32-00589мол_а

[1] Абдулвахидов К.Г., Витченко М.А. и др., Журнал технической физики.-2007.-Т. 77.- вып. 11.- С. 69 – 73.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ УГЛЕРОДНЫХ ИНВЕРТИРОВАННЫХ ОПАЛОВ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА

Сухинина Н.С., Масалов В.М., Жохов А.А., Зверькова И.И., Емельченко Г.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твёрдого тела Российской академии наук

e-mail: suhinina@issp.ac.ru

Важнейшими параметрами углеродных материалов, используемых в электрохимических источниках питания в качестве электродов, являются площадь удельной поверхности, размеры и топология пор. Электроды на основе углерода в сочетании с оксидами металлов, обладающие «псевдоёмкостью», позволяют достигать плотности энергии аккумуляторных батарей и длительного жизненного цикла и плотности мощности конденсаторов с двойным электрическим слоем.

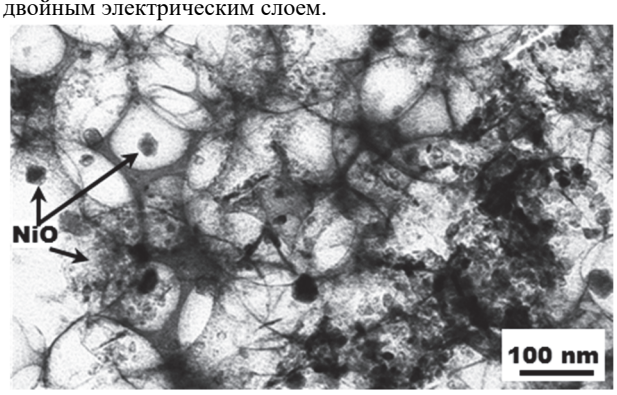


Рис.1. ПЭМ-изображение углеродного инвертированного опала, модифицированного соединениями никеля.

В работе представлены результаты исследований структуры и свойств углеродных инвертированных опалов, полученных темплатным способом, поверхность которых модифицирована соединениями никеля. Показано, что температура обработки опаловых матриц, заполненных углеродными прекурсорами, и размеры частиц SiO_2 в исходной матрице оказывают решающее влияние на формирование и развитие пористой структуры. Определён фазовый состав синтезированных углеродных композитов с различным массовым содержанием Ni. С помощью электронной микроскопии определён размер никелевых соединений: 10-35 нм. Площадь удельной поверхности пор углеродных материалов составила 850 $м^2/г$, а площадь удельной поверхности композита, содержащего 40 масс. % Ni, уменьшилась более чем в три раза – до 250 $м^2/г$. Электрохимические измерения полученных углеродных образцов показали перспективность использования их в качестве электродного материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (Грант № 16-29-06164).

РЕГУЛИРОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ И СТРУКТУРЫ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ WO_X ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА

Фоминский Д.В.[1], Гнедовец А.Г.[2], Романов Р.И.[1]

[1] НИЯУ МИФИ

[2] ИМЕТ РАН

e-mail: dmitryfominski@gmail.com

Исследованы возможности регулирования морфологии и структурного состояния тонкопленочных слоев из оксида вольфрама, применяемых для формирования эффективных катализаторов получения водорода. Пленки WO_x создавались методом импульсного лазерного осаждения при варьировании состава и давления буферного газа, а также температуры осаждения и постобработки. Для исследования пленок использовались методы сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и рамановской спектроскопии. Установлено, что при осаждении в разреженном воздухе на подложках, поддерживаемых при комнатной температуре, в зависимости от давления воздуха (10 – 100 Па) удается сформировать аморфные пленки как с плотной, так и различной по пористости структурой. Отжиг пленок вызывал частичную кристаллизацию с образованием разупорядоченной моноклинной фазы, но морфологические особенности пленок практически не изменялись. При осаждении на подложки, нагретые до 500°C, протекали процессы кристаллизации и образования нанопластинок или наноигл триоксида вольфрама.

Установлено, что наилучшими каталитическими свойствами в растворе 0,5M H_2SO_4 обладали пленки, полученные низкотемпературным осаждением с постобработкой на воздухе при 500°C. Пленки состояли из округлых наночастиц WO_3 размером ~50 нм, соединенный короткими нано-мостиками между собой и с подложкой. При использовании таких пленок перенапряжение реакции выделения водорода удается снизить до 100 мВ, а тафелевский наклон катодных поляризационных кривых до 80 мВ. Пленки с более совершенной кристаллической структурой, формирующейся при высокотемпературном осаждении, не обеспечивали таких характеристик, что могло быть обусловлено высоким контактным сопротивлением на границе неплотно упакованных нанокристаллов со стеклоуглеродом.

МЕЗОСТРУКТУРА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ СОСТАВА $Ce_{0.5}Zr_{0.5}O_2 – SiO_2$, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БЕТА-ЦИКЛОДЕКСТРИНА

Цвигун Н.В.[1], Фёдорова А.А.[2], Лебедев Л.Г.[2], Фролов Д.Д.[2], Морозов И.В.[2], Копица Г.П.[3,4], Almasy L.[5]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Москва, Россия*

[2] *Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[3]*НИЦ КИ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина*

[4]*Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург*

[5]*Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary*

e-mail:n_tsvigun@mail.ru

Система сложных оксидов $Ce_xZr_{1-x}O_2–SiO_2$ сочетает в себе достоинства обоих входящих в нее компонентов. Наличие оксида кремния обуславливает высокую удельную поверхность получаемого сложного оксида, а $Ce_xZr_{1-x}O_2$ – его относительную химическую инертность, значительную кислородную емкость и высокую ионную (кислородную) проводимость. Благодаря этому система может являться эффективным носителем для трехмаршрутных катализаторов, используемых для нейтрализации отходящих газов автомобилей.

В настоящей работе для синтеза образцов $Ce_{0.5}Zr_{0.5}O_2 – SiO_2$ был впервые применен золь-гель метод с использованием циклодекстринов (ЦД) в качестве структурообразующих агентов. Основными достоинствами метода являются: доступность исходных реагентов, простота аппаратурного оформления, чистота и высокая степень однородности получаемых продуктов, большие величины удельной поверхности получаемых оксидных продуктов (200 - 650 м^2/г), а также возможность получения сложных по составу образцов.

Микро- и мезоструктура сложных оксидов $Ce_{0.5}Zr_{0.5}O_2 – SiO_2$, полученных с разной концентрацией β-ЦД c = 27.4, 53.2, 65.4 и 75.9 масс.%, была изучена с использованием методов: РФА, СЭМ, малоуглового рассеяния нейтронов и низкотемпературной адсорбции азота. Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора плотности амплитуды рассеяния, определены характерные размеры рассеивающих неоднородностей и их удельные поверхности

АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК $SI_{1-X}MN_X$ (X~0.5) С САМООРГАНИЗОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ

Черноглазов К.Ю.[1], Николаев С.Н.[1], Рыльков В.В.[1], Васильев А.Л.[1], Лихачев И.А.[1], Тугушев В.В.[1], Чесноков Ю.М.[1], Пашаев Э.М.[1], Зенкевич А.В.[2], Semisalova A.S.[3]

[1]*НИцентр «Курчатовский Институт»*

[2]*Московский физико-технический институт*

[3]*Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Institute of Ion Beam Physics and Materials Research*

e-mail: expe28@gmail.com

В работе представлены результаты детальных исследований свойств нестехиометрических пленок $Si_{1-x}Mn_x$ (x≈0.51-0.52), полученных методом импульсного лазерного осаждения на подложках Al_2O_3 (0001) при 340°C в теневой геометрии, когда атомы Mn и Si осаждаются на подложку в результате столкновения с атомами буферного газа. При этом могут достигаться низкие энергии осаждаемых атомов и одновременно высокие скорости их осаждения.

Обнаружена смена знака аномального эффекта Холла в нестехиометрических пленках $Si_{1-x}Mn_x$ (x ≈ 0.51-0.52), в которых ранее нами наблюдался высокотемпературный ферромагнетизм (T_C > 300 K), сопровождаемый проявлением положительного аномального эффекта Холла, усиливающегося с уменьшением температуры [1, 2].

Было показано, что намагниченность образцов определяется двумя фазами: высокотемпературной с T_C ≈ 370 K и низкотемпературной с T_C ≈ 46 K, причем аномальный эффект Холла с понижением температуры изменяет знак с положительного на отрицательный при температуре 30-50 K (рис. 1)., зависящей от толщины $Si_{1-x}Mn_x$ пленки.

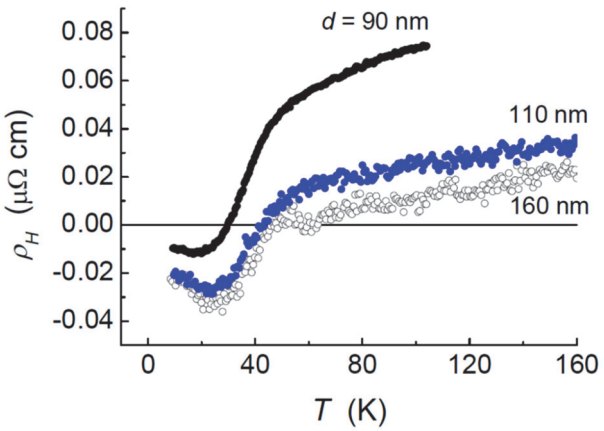


Рис.1. Температурная зависимость холловского сопротивления $\rho_H(T)$ в магнитном поле B = 1.2 T для пленок $Si_{1-x}Mn_x$ с различной толщиной. (d ≈ 90, 110 и 160 нм).

Результаты объясняются структурной самоорганизацией поликристаллической пленки, в результате которой формируется два слоя с близкими значениями удельной проводимости и существенно отличающимися (≥10 раз) размерами кристаллитов. Обсуждаются особенности образования магнитных дефектов в этих условиях и их обмен через спиновые флуктуации по механизму [3].

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 15-07-01160, 16-07-00798 и 16-07-00657.

[1] V.V. Rylkov, E.A. Gan’shina, O.A. Novodvorskii et al., Europhys. Lett. 103, 57014 (2013).

[2] V.V. Rylkov, A.S. Bugaev, O.A. Novodvorskii et al., J. Magn. Magn. Mater., 2015 383, 39–43.

[3] V.N. Men’shov, V.V. Tugushev, S. Caprara et al., Phys. Rev. B 83, 035201 (2011).

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФЕРРИТ-СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ МАРГАНЕЦ-ЦИНКОВЫХ ФЕРРИТОВ И СОПОЛИМЕРОВ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

Шакирзянов Р.И.[1], Мингажева З.В.[1], Астахов В.А.[1], Кочервинский В.В.[2], Бедин С.А.[3], Андреев В.Г.[1], Морченко А.Т.[1], Костишин В.Г.[1], Панина Л.В.[1]

[1]*НИТУ «МИСиС»*

[2]*НИФХИ им. Л.Я. Карпова*

[3]*МПГУ*

e-mail: dratm@mail.ru

Методом кристаллизации матричной фазы из раствора и термопрессования под давлением получены при разных режимах композиционные материалы на основе сополимеров поливинилиденфторида, гранулированных и негранулированных порошков марганец-цинковых ферритов марки 2000НМ: «полимер Ф-42 / Mn-Zn феррит», «полимер СКФ-32 / Mn-Zn феррит», «полимер Ф2М / Mn-Zn феррит». Такие материалы потенциально пригодны для применения в электронике и наноэлектронике, микросистемной технике и радиотехнических приложений (запоминающие устройства, измерительные, управляющие и мониторинговые системы, радиопоглощающие и экранирующие покрытия с управляемой дисперсией).

В широком диапазоне частот исследованы электрофизические характеристики (значения комплексной проницаемости и электропропроводности) образцов исходных материалов и приготовленных из них композитов. Обнаружено значительное различие значений диэлектрической проницаемости на композитах с гранулированным и негранулированным наполнителем.

Полученные результаты анализируются в рамках модельных представлений в приближении эффективной среды. Показано, что при концентрации наполнителя около 50 об.% наблюдается резкий рост эффективного значения действительной части диэлектрической проницаемости композита в случае использования слабопроводящих частиц наполнителя. В свою очередь гранулированные порошки и спеченные керамические образцы таких ферритов сами могут рассматриваться как композит с повышенным эффективным значением диэлектрической проницаемости.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ АТОМОВ FE В ДВОЙНЫХ ПЕРОВСКИТАХ A_2FENBO_6 (A = CA, SR, PB, BA) МЕТОДОМ XAFS-СПЕКТРОСКОПИИ

Шуваева В.А.[1], Раевский И.П.[1], Зубавичус Я.В.[2], Власенко В.Г.[1], Раевская С.И.[1], Чен Г.[3]

e-mail: v_shuvaeva@mail.ru

[1]*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета*

[2] *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

[3]*Институт прикладной физики и материаловедения, факультет науки и технологии университета Макао*

Структурные искажения оказывают существенное влияние на диэлектрические свойства соединений семейства перовскита. В сложных перовскитах точное определение положений атомов дифракционными методами затруднено, поскольку несколько различных атомов занимают одну и ту же кристаллографическую позицию. В этом случае дополнительная структурная информация может быть получена на основе анализа спектров поглощения, чувствительных к локальной структуре этих соединений.

Методом XAFS-спектроскопии проведено исследование ближнего окружения атомов Fe в ряду соединений с общей формулой A_2FeNbO_6 (A = Ca, Sr, Pb, Ba). Спектры поглощения были измерены в области K-края поглощения Fe по методике на пропускание на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского центра синхротронного излучения. Для получения информации о величине смещения атомов Fe был проведен анализ как предкраевой области, так и дальней структуры спектров поглощения, показавший, что в образцах Sr_2FeNbO_6 и Ca_2FeNbO_6 атомы Fe имеют симметричное кислородное окружение, и, следовательно, располагаются вблизи центров кислородных октаэдров, в то время как в Pb_2FeNbO_6 кислородное окружение Fe более искажено. Наибольшее смещение атомов Fe, сопоставимое по величине со смещением в Fe_2O_3, обнаружено в Ba_2FeNbO_6, макроскопическая симметрия которого является кубической. Таким образом, величина смещения атомов Fe в исследованном ряду соединений коррелирует с ионным радиусом атома A и толерансфактором.

Работа выполнена при поддержке Южного федерального университета (грант N213.01-2014/011-VG) при использовании оборудования КЦСИ «Курчатовский институт».

Микросимпозиум 5. Химически- и радиационно-стойкие материалы

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ СРЕДАМИ В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Амирханов И.В., Саркар Н.Р., Сархадов И., Тухлиев З.К., Шарипов З.А.

Объединенный институт ядерных исследований, E-mail: zarif@jinr.ru

Гиперболическое уравнение теплопроводности [1,2] описывают процессы теплопереноса в локально-неравновесных условиях. Одним из процессов приводящим к локально-неравновесным условиям является облучение материалов тяжелыми ионами высоких энергий. Взаимодействие ионов высоких энергий с материалами происходит большим выделением энергии в малом объеме во временах порядка ~ 10^{-14} с и в таких временах для описания тепловых процессов рекомендуется использовать гиперболическое уравнение теплопроводности.

В гиперболическом уравнении теплопроводности важным фактором является наличие коэффициента релаксации $\tau \sim 10^{-7}$-10^{-13}с, перед старшим производном по времени. При временах 10^{-7}-10^{-13}с коэффициент релаксации τ становится большим и в уравнении эффект волнового характера становится явным. В данной работе в рамках гиперболического уравнения теплопроводности проведено исследование термических процессов и получены результаты в металлических мишенях при облучении тяжелыми ионами высоких энергий.

[1] Лыков А.В. Тепломассобмен: 2-ое изд., М. Энергия, 1978, 480с.

[2] С. Л. Соболев. Локально-неравновесные модели процессов переноса. //УФН, 167:10 (1997), с 1095–1106.

СТРОЕНИЕ, ХИМИЧЕСКАЯ И РАДИАЦИОННАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР – ПИРОЛИЗАТОВ ДИФТАЛОЦИАНИНОВ ЛАНТАНОИДОВ И АКТИНОИДОВ

Байрамуков В.Ю., Лебедев В.Т., Капустин В.К., Тихонов В.И.

НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова e-mail: vbayramukov@gmail.com

Методами атомно-силовой микроскопии, рентгеноструктурного анализа и малоуглового рассеяния нейтронов исследованы многоуровневые углеродные структуры – матрицы, инкапсулирующие атомы лантаноидов и актиноидов в результате температурных превращений органических соединении в ходе пиролиза в инертной атмосфере. Показано, что при варьировании температуры отжига (800-1600ºС) происходит переход из кристаллической фазы дифталоцианина металла в аморфную фазу пиролизата с образованием разветвленной сети нанокластеров из атомов углерода с инкорпорированным атомом.

Тесты на термическую, радиационную устойчивость и длительное выщелачивание при различных значениях pH показали, что инкорпорированный атом радионуклида прочно удерживается в такой матрице, что может найти применение для долговременного хранения радиоактивных отходов и их трансмутации.

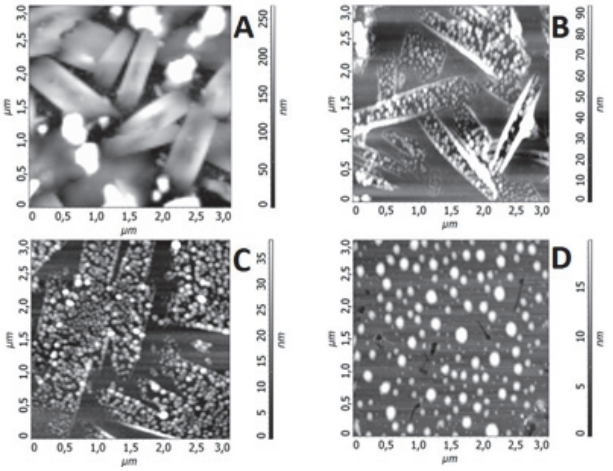


Рис.1. Исходные кристаллы дифталоцианина иттрия (1A) и его пиролизаты (1B-1D), полученные при температурах 790; 850; 1040ºС соответственно

[1] В. И. Тихонов, В. К. Капустин, В. Т. Лебедев и др. // Углеродный композит на основе пиролизованных дифталоцианинов для иммобилизации высокоактивных отходов атомной промышленности // Радиохимия, 2016, т. 58, № 5, с. 469–477

[2] V.Y. Bairamukov, D.V. Lebedev, V.I. Tikhonov // Structure of the carbon matrix made by pyrolyzed yttrium bis-phthalocyanine by atomic force microscopy // Proceedings of InterM, Antalya, Turkey, October 10-13, 2013 Series: Springer Proceedings in Physics, 2014, V. 154, P. 189-195.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА CVD АЛМАЗОВ ДО И ПОСЛЕ РАЗЛИЧНЫХ ПОСТ ГЕНЕТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Винс В.Г.[1], Елисеев А.П.[2]
[1] ООО «ВЕЛМАН»
[2] Институт Геологии и Минералогии СО РАН им. академика Соболева
e-mail: vgvins@gmail.com

Исследованы CVD алмазы типа IIa, полученные по традиционной технологии разложения метана в смеси с водородом и последующим осаждением алмаза на нагретую подложку.

Свойства алмазов в исходном состоянии: а) цвет – серовато-коричневый различной интенсивности; б) в ИК поглощении - полоса (≤0.3 $см^{-1}$) при 1250 $см^{-1}$; в) в УФ и видимом поглощении - край при 225 нм и слабое поглощение в полосах донорного азота; г) в ФЛ ($\lambda_{возб}$ =365 нм) – система 467.5 и NV-система 575.0 нм; при $\lambda_{возб}$ =532 нм – NV-системы (575, 637 нм), иногда Si – система 737 нм; плюс дублет линий 595.0/596.1 нм; д) в ТСЛ – пики в диапазоне 270-350 К.

После облучения электронами (3 МэВ/(4÷5)×10^{18} $см^{-2}$) и последующего отжига (800°С, 2 часа): а) кристаллы приобретали темно-красный (с оттенками) цвет, который в данном случае связан не с NV-, а Si- дефектами; б) в ИК поглощении - появлялся рамановский пик 1332 $см^{-1}$ и незначительно усиливалась полоса 1250 $см^{-1}$; в) в УФ и видимом диапазоне - край поглощения смещался к 450 нм и на фоне новой широкой полосы 600 – 750 нм появляются острые линии при 487,0; 507,5; 518,0; 594,0; 724,0; 733,4; 736,6 нм; г) в ФЛ ($\lambda_{возб}$ =365 нм) - вместо системы 467.5 нм слабое широкополосное свечение 400 – 550 нм и NV^0 - система 575.0 нм; при $\lambda_{возб}$ =532 нм – без изменений: NV-системы 575, 637 нм, иногда Si – система 737 нм плюс дублет линий 595.0/596.1 нм; д) в ТСЛ появляются новые пики 160-170 К и доминирующий пик при 440-450К.

Более длительный отжиг (800°С, 24 часа) облученных (3 МэВ/(4÷5)×10^{18} $см^{-2}$) алмазов приводит к дальнейшим изменениям: а) окраски - на темную желто-зеленую, б) в ИК поглощении - более отчетливому проявлению пика 1332 $см^{-1}$ и полосы 1250 $см^{-1}$; в) в видимом поглощении - край смещается к 400 нм и дополнительно появляются новые интенсивные линии 575, 595, иногда 637 нм; г) в ФЛ ($\lambda_{возб}$ =365 нм)- дополнительно к имевшейся NV^0 - системе 575 нм появляется полоса 440 нм и несколько узких линий при 453,9; 503,4; 525,7 и 542,2 нм; при $\lambda_{возб}$ =532 нм - остаются NV - системы 575 и 637 нм, но исчезает дублет 595.0/596.1 нм; д) в спектрах ТСЛ доминирующий пик 440 – 450 К смещается к 470 К.

HPHT отжиг алмазов (2300°С/7 ГПа/10 мин.) приводит к появлению слабой желтой окраски и усилению поглощения в полосах донорного азота. По-видимому, в составе дефектов, обуславливающих начальную серую - коричневую окраску кристаллов, содержатся атомы азота, которые при HPHT отжиге освобождаются и трансформируются в С-дефекты.

Осветление кристаллов наблюдается при отжиге в аргоново - водородной плазме (1700°С/1 торр/30 мин) и при плазменно-дуговом отжиге в атмосфере гелия (2100° С/25 торр/0.5-2 мин).

НЕОРАНИЧЕСКИЕ КРИИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ РАБОТЫ В ИНТЕНСИВНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПОЛЯХ БУДУЩИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА LHC С ВЫСОКОЙ СВЕТИМОСТЬЮ И FCC

Коржик М.В.
НИИ Ядерных Проблем БГУ
e-mail: mikhail.korjik@cern.ch

Приведен обзор результатов исследований радиационных повреждений сцинтилляционных материалов для применения в экспериментах по физике высоких энергий. Повреждения вызваны гамма-квантами и адронами высоких энергий, основными компонентами радиационного фона на экспериментальных установках большого адронного коллайдера (LHC) и будущеего циркулярного коллайдера FCC. Программы физических исследований на LHC потребуют увеличения светимости до 300 $фб^{-1}$ в год с 2025 года. При таких светимостях, заряженные адроны с флюенсом выше, чем 10^{14} $р/см^2$ в год в области больших значений псевдобыстроты будут оказывать существенное влияние на радиационное повреждение материалов. На порядок более сильные эффекты повреждения ожидаются в экспериментальной зоне FCC. Кроме того, с увеличением активации экспериментальных установок, они станут практически недоступными для периодической замены элементной базы. Поэтому, для выбора материалов новых детекторов для работы в условиях интенсивных радиационных полей, актуальной становится оценка рисков их отказов.

До сих пор, рассмотрение ухудшения свойств сцинтилляционных материалов при облучении ионизирующим излучением концентрировалось на изменении оптического пропускания, поскольку принималось во внимание требование способности электромагнитных калориметров поддерживать высокое разрешение по энергии на протяжении полного срока работы детектора. Это обусловлено тем, что ухудшение энергетического разрешения непосредственно связано с уменьшением светового сбора в детекторных элементах. Однако, изменение оптического пропускания представляет собой лишь часть эффектов. Следует принять во внимание также эффекты наработки новых дефектов в кристаллической матрице, равно как и взаимодействие между сцинтилляционным материалом и радиоизотопами, генерируемыми в детекторах вследствие ядерных реакций. Сочетание этих эффектов может привести к значительному ухудшению параметров детектора: увеличению постоянного члена в энергетическом разрешении, увеличению нелинейности отклика детектора и ухудшению его временного разрешения.

Будет рассмотрен подход для выбора сцинтилляционных материалов, способных работать в различных частях детекторов, в частности, в торцевых частях электромагнитных и адронных калориметров. Доклад также рассматривает подходы к разработке детекторных модулей, способных сохранять работоспособность в течение всего периода эксплуатации LHC и FCC.

РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ ПРИБОРОВ НА ОСНОВЕ SIC.

Лебедев А.А.[1], Калинина Е.В.[1], Козловский В.В.[2]
[1]ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
[2] СПбГПУ
e-mail: shura.lebe@mail.ioffe.ru

Большая ширина запрещенной зоны SiC до 3.3 eV обеспечивает работоспособность приборов до 1000^0C и выше.

Во ФТИ им А.Ф.Иоффе было проведено широкое исследование электрофизических свойств карбида кремния, полученные результаты были использованы для разработки технологии роста эпитаксиальных слоев SiC с заданными параметрами. Это позволило создать экспериментальные образцы целого ряда полупроводниковых приборов на основе SiC. Проведенные исследования показали, что разработанные SiC приборы по предельным рабочим температурам, удельным коммутируемым мощностям и радиационной стойкости соответствуют ранее сделанным теоретическим оценкам.

На основе диодных структур с барьерами Шоттки, сформированными на 4*H*-SiC эпитаксиальных слоях, были изготовлены спектрометрические детекторы ядерных излучений, работающие с эффективностью собирания заряда до 100% и высоким разрешением по энергии (0.34%), соизмеримым с лучшими образцами Si-детекторов (Рис. 1) [1].

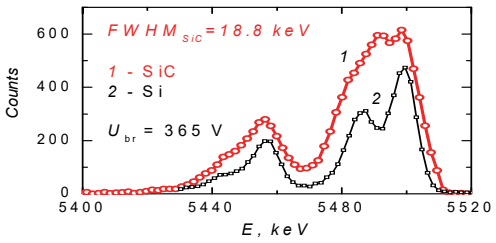


Рис.1. Спектр α–частиц с энергией 5.5 МэВ, снятый при 25°C 4H-SiC детектором с барьером Шоттки (1) в сопоставлении с прецизионным кремниевым детектором (2). Напряжение смещения на SiC-детекторе 365 В, разрешение по энергии составляет 18.8 кэВ (0.34%).

В ФТИ совместно с СПбГПУ проведены и продолжаются работы по изучению влияния на структуру и свойства SiC, а также приборов на его основе, облучения α-частицами, электронами, легкими и тяжелыми ионами. Показано, что диоды не деградируют, а детекторы сохраняют свои детектирующие свойства после облучения при температуре 300 К электронами дозой 10^{15} см$^{-2}$, быстрыми нейтронами флюенсом 10^{15} см$^{-2}$, протонами $1.4x10^{16}$ см$^{-2}$, гамма-квантами 10^7 рад [2,4].

[1] Н.Б. Строкан, А.М. Иванов, Е.В. Калинина и др. // ФТ*П*, 39 (2), 382 (2005)..

[2] А.А. Лебедев, А.М. Иванов, Н.Б. Строкан //ФТП, 38 (2), 129 (2004).

[3] А.А. Лебедев, В.В. Козловский // ФТП, 48 (10), 1329 (2014).

[4] V.V.Kozlovski, A.A.Lebedev, E.V.Bogdanova, J. Appl.Phys., 117, 155702 (2015)

КЛАСТЕРНАЯ СТРУКТУРА АМОРФНЫХ ГЛАДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ПЛЕНОК CD_X (x~0.5) ИЗ ТОКАМАКА Т-10

Свечников Н.Ю., Станкевич В.Г., Колбасов Б.Н., Зубавичус Я.В., Велигжанин А.А., Соменков В.А., Суханов Л.П., Лебедев А.М., Меньшиков К.А.
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: Svechnikov47@mail.ru

Аморфные гладкие углеводородные пленки CD_x (x ~ 0.5) образуются под действием эрозии графитовых элементов вакуумной камеры токамака Т-10 (НИЦ “Курчатовский институт”, Москва) во время разрядов дейтериевой плазмы и чистящих разрядов при температуре стенок камеры до 400 К [1, 2]. Пленки CD_x имеют физико-химические свойства, сходные с тритиевыми пленками CT_x из токамака JT-60SA с углеродными элементами камеры, а также термоядерного проекта ИТЭР. Образование этих пленок влечет за собой серьезные проблемы, связанные с радиационной безопасностью, поэтому необходимо знать свойства и структуру подобных продуктов эрозии.

Исследования структуры пленок CD_x проводились с применением малоуглового и высокоуглового рентгеновского рассеяния с использованием СИ в интервале $q = 0.04 – 100$ нм$^{-1}$, а также дифракции нейтронов.

Структура пленок представляет собой сложную аморфную углеводородно-дейтериевую систему с большим содержанием изотопов водорода (H+D)/C ≈ 1, с состояниями углерода sp^3 + sp^2 (где sp^3 ~ 60 – 80%), с фрактальной (самоафинной) структурой углеродной сетки.

Структурные элементы состоят из sp^2-нанокластеров с типичными размерами ~1 – 60 нм. К ним относится фрагмент C_{13} из трех взаимосвязанных бензольных колец и минимальный фрактальный sp^2-агрегат $9×C_{13}$. Эти графеноподобные sp^2-кластеры образуют в 3D-пространстве взаимосвязанную “дырявую” решётку, у которой ненасыщенные химические связи заполнены атомами D, H, линейными sp^2 C=C, C=O и sp^3-элементами: C–C, C–H(D), C–O, O–H, COOH, C_xH_y и др.

[1] Крауз В.И., Мартыненко Ю.В., Свечников Н.Ю. и др. // УФН, 2010, том 180, № 10, с. 1055-1080.

[2] Свечников Н.Ю., Станкевич В.Г. и др. // Поверхность. Рентген., синхр. и нейтр. исслед., 2015, № 12, с. 16–23.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ d-МЕТАЛЛОВ В ГЛАДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ПЛЕНКАХ ИЗ ТЕРМОЯДЕРНЫХ УСТАНОВОК НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АДСОРБАТА

Станкевич В.Г., Свечников Н.Ю., Суханов Л.П., Лебедев А.М., Меньшиков К.А.

НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: vl-stan@mail.ru

На примере исследования гладких аморфных углеводородных пленок CD_x (x ~0.5) из разрядов дейтериевой плазмы токамака Т-10 [1] рассмотрено влияние примесей d-металлов, т.е. продуктов эрозии стенок камеры, на структуру углеродной сетки и электронную структуру пленки. В составе микропримесей (Fe, Mo, Cr, Ni и др.) основной вклад вносят атомы Fe (0,7 ат.%) в состоянии Fe^{3+} со спином S=5/2. Они образуют кластерную структуру типа FeC6,2 с октаэдрическим окружением атомами углерода. Эти примеси обусловливают отличия в поверхностных электронных состояниях обеих сторон толстой пленки, изменяя величину запрещенной зоны E_g в интервале ≈2.5–3.1 эВ, способствуют конверсии $sp^3 \rightarrow sp^2$ и оказывают каталитическое влияние на процесс термодесорбции.

Впервые установлено, что наиболее заметным отличием всех типов пленок является величина E_g. Особенно это видно на спектрах фотоэмиссии пленок CH_x-Me из разрядов сильноточного плазменного ускорителя КСПУ с высокоинтенсивным потоком водородной плазмы, когда была найдена большая концентрации примесей W, Fe, Cr, Mn, Cu в количестве 1–5 ат.%. Поэтому сильно изменяется форма спектра валентной зоны, появляется зона примесей Mn3d, Cu3d, W5d в области энергий связи $E_{св}$ =2–4 эВ и выше, ширина E_g уменьшается до ≈1.2–1.3 эВ. Доля состояний sp^2 составляет 22–25%. Этому способствуют бóльшие величины примесей d-металлов, имеющие каталитический эффект по конверсии $sp^3 \rightarrow sp^2$, в пленках из КСПУ, по сравнению с пленками CD_x из рабочих разрядов токамака с E_g ≈2.9–3.1 эВ, sp^2= 14–17%.

[1] Н.Ю. Свечников, В.Г. Станкевич и др. // Поверхность. Рентген., синхр. и нейтрон. исслед. 2008, №12, с. 14–24.

[2] I. Arkhipov, N. Klimov, N. Svechnikov, et al. // Journal of Nuclear Materials. 2013, V. 438, P. S1160–S1163.

МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКРОСКОПИЯ ГРАДИЕНТНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ

Кириченко В.Г.
Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина
e-mail: val_kir48@mail.ru

В последнее время значительное внимание уделяется исследованию и разработке функциональных градиентных материалов с высокими технологическими и эксплуатационными свойствами. Оптимизация физико-механических свойств градиентных металлических материалов возможна при введении в поверхностные слои наноразмерных частиц. Сплавы циркония и процессы их формирования широко исследуются с применением различных методов. Исследование приповерхностных слоев сплавов циркония необходимо для целенаправленного выбора типа и вида обработки поверхности сплавов циркония с целью создания градиентных структур для повышения коррозионной и радиационной стойкости.

Для проведения исследования были изготовлены сплавы: Zr-1,03ат.%Fe; Zr-0,51ат.%Fe; Zr-0,51ат.%Fe-M (M = Nb, Sn, Ta). Использовалась мессбауэровская спектроскопия на ядрах ^{57}Fe в геометрии обратного рассеяния с регистрацией электронов внутренней конверсии (МСКЭ). Анализ поверхности образцов производили с помощью спектрометра «Camebax MBX 268» и сканирующих электронных микроскопов JEOL JSM-840 и «Quanta 3D».

Обнаружено, что увеличение поверхностной концентрации атомов железа в сплавах циркония в слое толщиной до 0,3 мкм связано с увеличением размеров включений при росте температуры отжига сплавов. Рост степени обогащения начинается с температур отжига 900 К и размеров включений 45 нм. В рамках простой модели асимметричного роста интерметаллических включений, приводящего к их миграции и взаимодействию с границами зерен, определен коэффициент диффузии атомов железа в интерметаллическом включении $D_{Fe}=3{,}5\cdot10^{-3}$ см^2/с. что ниже, чем коэффициент диффузии атомов Fe в альфа - цирконии ($2{,}5\cdot10^{-2}$ см^2/с).

Таким образом, путем создания обогащенного интерметаллидами поверхностного слоя возможно формирование градиентных поверхностных структур.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА Cs-ЗАМЕЩЕННОГО ИВАНЮКИТА

Паникоровский Т.Л.[1,2], Яничева Н.Ю.[2], Кривовичев С.В.[1,2]
[1] *Каф. Кристаллографии СПбГУ*
[2] *Центр наноматериаловедения КНЦ РАН*
e-mail: taras.panikorovsky@spbu.ru

Группа иванюкита включает в себя несколько минералов с микропористыми титаносиликатными каркасами, способными к селективной сорбции крупных щелочных катионов [1-4]. В докладе будут рассмотрены результаты изучения кристаллической структуры Cs-замещенного иванюкита, полученного после обработки природного иванюкита-Na-T 1M раствором HCl и 1M раствором CsCl. Кристаллическая структура Cs-замещенного иванюкита была уточнена в пространственной группе $P\text{-}43m$ (a = 7.810(1) Å, V = 476.4(2) Å^3) до фактора сходимости R_1 = 0.073 для 199 независимых рефлексов. Структура представляет собой трехмерный каркас, в пустотах которого находятся катионы Cs^+ и K^+, а также молекулы H_2O. Кристаллохимическую формулу полученного материала можно записать как $Cs_{1.90}K_{0.13}Ti_4O_{2.03}OH_{1.97}(SiO_4)_3\cdot3.49H_2O$.

[1] Yakovenchuk V.N., Nikolaev A.P., Selivanova E.A. et al. // American Mineralogist, 2009, **94**, 1450-1458,

[2] Яничева Н.Ю., Калашникова Г.О. // Вестник МГТУ, 2014, 17, **1**, 106-111.

[3] Николаев А.И., Иванюк Г.Ю., Кривовичев С.В. и др. // Вестник КНЦ РАН, 2010, **3**, 51-62.

[4] Николаев А.И., Герасимова Л.Г, Маслова М.В. // Вестник КНЦ РАН, 2014, **2**, 89-97.

Микросимпозиум 6. Материалы для детекторов и сенсоров

СОВРЕМЕННЫЕ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЕ СИСТЕМЫ. ОТ ПЕРВЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ALICE К КРУПНЕЙШИМ СИСТЕМАМ В ПРОЕКТАХ MEGASCIENCE

Акиндинов А.
ГНЦ РФ ФГБУ ИТЭФ

1. Имевшиеся детекторы для времяпролетных измерений в экспериментах по физике высокой энергии и релятивистской ядерной физике к началу работ по созданию супердетектора ALICE на БАК.
2. Разработка газовых времяпролетных детекторов, работающих в режиме «насыщенной лавины» требования к поверхности электрода требования к форме электрода
3. Переход к детекторам, содержащим резистивный электрод (от 10^{13} до 10^{8} Ом*см) подложки из полупроводящего стекла керамические материалы с варьируемым сопротивлением (варианты детектора с поверхностным и объемным сопротивлением) варианты организации систем, требования к стойкости материалов и «старению» детекторов
4. Реализация детекторов на основе стеклянных подложек в проектах MEGASCIENCE (ALICE(БАК), STAR(RIHC))
5. Подготовка к реализации радиационно стойких и высокозагрузочных времяпролетных детекторов на основе керамических материалов для создаваемых проектов (CBM(FAIR) и MPD(NICA))
6. Заключение.

ДЕФОРМАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННАЯ СВЕТОГЕНЕРАЦИЯ НАНО-МИКРОЧАСТИЦ ЛЮМИНОФОРА В МАТРИЦЕ ФОТОПОЛИМЕРА

Банишев А.Ф., Банишев А.А.
Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»
banishev@mail.ru

Механолюминесценция (МЛ) — это способность материалов люминесцировать (светиться) при воздействии механических напряжений (например, при изгибе, сжатии, ударе, вибрации и т.д.) К настоящему времени известноваку большое количество материалов, в которых проявляется свойство механолюминесценции. При одинаковых условиях воздействия интенсивность механолюминесценции разных материалов может отличаться на порядки. Известны материалы с высоким выходом механолюминесценции. Хорошо известным примером такого материала является люминофор ZnS:X , (где X=Mn, Cu, Al). В последнее время проявляется заметный интерес к исследованиям механолюминесценции щелочноземельных алюминатов с примесью редкоземельных элементов, например алюминатов стронция (кальция) Sr(Ca)AlO4:(Eu^{2+},Dy^{3+}). Эти алюминаты (люминофоры длительного послесвечения) составляют важный класс фосфоресцирующих материалов, которые имеют высокую квантовую эффективность и длительность свечения в видимой области спектра и обладают ярко выраженным свойством механолюминесценции. Это определило ряд новых возможностей практического использования этих материалов, в частности в качестве сенсорных элементов механических воздействий. Известны также работы, в которых предлагается использовать механолюминесцентные свойства нано-микрочастиц $SrAl_2O_4$:(Eu^{2+}, Dy^{3+}) для активации фотокаталитических процессов в тех участках вещества куда невозможен подвод излучения (света).

Несмотря на практический интерес к этим материалам, физические свойства этих материалов недостаточно изучены. К настоящему времени нет единого мнения относительно механизма возбуждения механолюминесценции $SrAl_2O_4$:(Eu^{2+}, Dy^{3+}). Нет убедительных данных о положении уровней энергии ионов активатора Eu^{2+} и ловушек в запрещенной зоне, не установлен тип ловушек – электронные это ловушки или дырочные.

В представленной работе проведены низкотемпературные исследования фото- и механолюминесценции композита на основе фотополимера и мелкодисперсного порошка люминофора $SrAl_2O_4$:(Eu^{2+}, Dy^{3+}), а также суспензии порошка люминофора в воде. Установлено, что интенсивность фотолюминесценции и фофоресценции композита быстро падают с уменьшением температуры от комнатной до температуры жидкого азота, в то время как интенсивность механолюминесценции практически на меняется при охлаждении. Полученный результат указывает на существование в исследуемом композите мелких ловушек ($E_p \approx kT_{300K}$), имеющих высокую вероятность термоактивации и глубоких ловушек ($E_p >> kT_{300K}$) термоактивация которых маловероятна. Интенсивность и длительность фотолюминесценции и фосфоресценции контролируются термоактивацией мелких ловушек. Интенсивность и длительность механолюминесценции в значительной степени определяются активацией глубоких ловушек при взаимодействии их с электрическими полями дислокаций.

Исследовалась механолюминесценция суспензии мелкодисперсного порошка люминофора SrAlO4:(Eu2+,Dy3+) в жидкости (в воде) в процессе кристаллизации жидкости (в процессе фазового перехода жидкость-кристалл) при быстром охлаждении в жидком азоте. Обнаружено свечение суспензии в момент кристаллизации жидкости, которое связывается с возбуждением механолюминесценции микрочастиц люминофора под действием скачка сжимающих механических напряжений, возникающих в обьеме при фазовом переходе жидкость-кристалл. Форма сигнала механолюминесценции существенно отличается от формы сигнала МЛ наблюдаемой при механическом ударе, что может свидетельствовать о других (не дислокационных) механизмах возбуждения механолюминесценции.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (Грант № 16-29-14003 офи_м)

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ОСАЖДЕНИЯ ПЛЕНОК ALN ПРИ ПОМОЩИ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ МЕТОДОВ

Белов И.В.[1], Минкин А.С.[1], Ильин В.А.[2], Книжник А.А.[1,2], Гавриков А.В.[2], Потапкин Б.В.[1,2]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] ООО «Кинтех Лаб «

e-mail: andrey.knizhnik@gmail.com

Нитриды V группы являются перспективными материалами для высокочастотной и силовой электроники благодаря большой ширине запрещенной зоны и высокой подвижности носителей. Поэтому большое внимание уделяется проблеме получения высококачественных слоев нитридных материалов, таких как GaN. Для достижения данной цели необходимым условием является создание качественных буферных слоев для обеспечения последующего осаждения GaN. AlN является перспективным материалом для создания буферного слоя на сапфировой подложке. Экспериментальные данные показывают однако наличие большой поверхностной шероховатости соответствующих слоев при определенных режимах осаждения. Поэтому в данной работе проводится исследование механизмов осаждения пленок AlN при помощи первопринципных исследований. В частности, рассматривается вопрос о химическом составе поверхности в процессе осаждения AlN при помощи метода молекулярно-лучевой эпитаксии, а также о лимитирующей стадии для скорости осаждения. Кроме того, рассмотрен вопрос о диффузионных ограничениях при осаждении пленок AlN, которые могут быть ответственными за возникновение поверхностной шероховатости.

АДМИТТАНС МДП-СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ВАРИЗОННОГО ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ И РТУТИ, ВЫРАЩЕННОГО МЕТОДОМ МЛЭ НА АЛЬТЕРНАТИВНЫХ ПОДЛОЖКАХ

Войцеховский А.В., Несмелов С.Н., Дзядух С.М.

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Сибирский физико-технический институт ТГУ

e-mail: vav43@mail.tsu.ru

Теллурид кадмия и ртути является основным материалом для создания высокочувствительных инфракрасных детекторов. Преимуществом альтернативных подложек на основе Si и GaAs при МЛЭ по сравнению с согласованными по постоянной решетке подложками из CdZnTe является снижение стоимости эпитаксиальных пленок, а также согласование элементов, выращенных на подложках из Si, с кремниевой схемой считывания по коэффициенту термического расширения. Целью данной работы является сравнение адмиттанса МДП-структур на основе *n*-$Hg_{1-x}Cd_xTe$, выращенного методом МЛЭ в ИФП СО РАН на подложках из Si (013) и GaAs (013).

Установлено, что параметром, наиболее чувствительным к типу подложки, является произведение дифференциального сопротивления области пространственного заряда (ОПЗ) в сильной инверсии на площадь структуры (RA). Это связано с тем, что тип подложки влияет на структурное совершенство эпитаксиальной пленки, которое определяет генерационный поток неосновных носителей заряда в ОПЗ. Для структур с приповерхностным варизонным слоем на основе *n*-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ с x=0.21-0.23 наибольшие значения RA (30 Ом×см^2 при 77 К) наблюдаются для пленок, выращенных на подложках из GaAs [1]. Значение RA для структур на основе *n*-HgCdTe, выращенных на подложках из Si, не превышает 5.5 Ом×см^2. Таким образом, технология МЛЭ *n*-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ с x=0.21-0.23 на подложках из GaAs в настоящее время позволяет получать более структурно-совершенные пленки, чем технология на подложках из Si.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 16-42-700759.

[1] Voitsekhovskii A.V., Nesmelov S.N. et al. // Infrared Physics & Technology, 2015, vol 71, p 236-241.

НОВОЕ ПОКОЛЕНИЕ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ ДЛЯ МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКИ НА ОСНОВЕ СЛОЖНЫХ ЦЕРИЙ-АКТИВИРОВАННЫХ ГРАНАТОВ

Досовицкий Г.А.[1], Федоров А.А.[2], Кузнецова Д.Е.[1], Гордиенко Е.В.[1], Карпюк П.В.[1], Михлин А.Л.[1], Волков П.А.[1], Ретивов В.М.[1], Мечинский В.А.[3], Борисевич А.Е.[3], Досовицкий А.Е.[4], Коржик М.В.[3]

[1] ФГУП «ИРЕА», НИЦ «Курчатовский институт»

[2] НПООО «РИИНК»

[3] НИИ Ядерных Проблем БГУ

[4] ЗАО «НеоХим»

e-mail: george.dos@gmail.com

Сцинтилляторы на основе сложных гранатов состава $Gd_3(Al,Ga)_5O_{12}$:Ce, разработка которых активно ведется в последнее время, рассматриваются как перспективные детекторные материалы для нового поколения медицинской диагностической техники. Для этих материалов, как в форме монокристаллов [1], так и в форме керамики [2] получен высокий световыход, до 55000 фот./МэВ что примерно в 1,5 раза превышает световыход текущего стандарта для ПЭТ сканнеров – Lu_2SiO_5:Ce. Кроме того, спектр испускания этих сцинтилляторов сочетается с диапазоном чувствительности современных фотоприемников – кремниевых ФЭУ, SiPM.

Для применения новых сцинтилляторов предстоит решить ряд важных задач, в числе которых оптимизация кинетики высвечивания сцинтилляций и подавление фосфоресценции в материале. Функциональные характеристики сцинтилляторов $Gd_3(Al,Ga)_5O_{12}$:Ce зависят от вариаций состава, в частности – соотношения Al/Ga; влияние этих параметров на световыход было достаточно подробно исследовано, а влияние на кинетические параметры сцинтилляции требует дополнительного изучения.

Данная работа направлена на разработку керамического сцинтиллятора на основе Ce-активированных Ga-Al-Ga гранатов. В докладе будут освещены результаты по получению и исследованию спектроскопических характеристик порошков и транслюсцентных керамик данных составов. В частности, исследовано влияние отклонения состава от стехиометрического за счет изменения содержания Ga.

[1] K. Kamada, S. Kurosawa et al // Opt. Mater. 2014, Vol. 36, p. 1942–1945.

[2] Z.M. Seeley, N.J. Cherepy et al // J. Cryst. Growth, 2013, Vol. 379, p. 79-83.

ДЕТЕКТОРЫ ДЛЯ КАЛОРИМЕТРИИ

Иньшаков В.И., Крышкин В.И., Скворцов В.В.

НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ ГНЦ ИФВЭ

Для создания калориметров, работающих на современных ускорителях, изучены характеристики целого ряда детекторов, обладающих высокой радиационной стойкостью и быстродействием. На основе проведённых исследований разработан новый тип детектора –газовая камера вторичной эмиссии, которая потенциально соответствует всем требованиям калориметрии при высокой светимости. Описывается текущее состояние дел с детектором и ближайшие планы.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ СЕМЕЙСТВА ЛАНТАНГАЛЛИЕВОГО СИЛИКАТА

Иржак Д.В., Рощупкин Д.В.

ИПТМ РАН

e-mail: irzhak@iptm.ru

Кристаллы семейства лантангаллиевого силиката являются перспективными материалами для опто- и акустоэлектроники и могут быть использованы для передачи и обработки информации в режиме реального времени. Кристаллы обладают пространственной группой симметрии 32 и хорошей температурной стабильностью вплоть до температуры плавления кристаллов ~1450 °C, что делает данные кристаллы перспективными в качестве высокотемпературных датчиков физических величин на прямой пьезоэлектрическом эффекте и поверхностных и объемных акустических волнах.

В докладе рассмотрены возможности применения методов рентгеновской дифрактометрии и топографии для исследования пьезоэлектрических и акустических свойств кристаллов как на лабораторных, так и синхротронных источниках рентгеновского излучения [1-3]. Исследованы свойства как упорядоченных ($Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$, $Ca_3NbGa_3Si_2O_{14}$), так и разупорядоченных ($La_3Ga_5SiO_{14}$, $La_3Ga_{5.5}Ta_{0.5}O_{14}$) кристаллов семейства лантангаллиевого силиката. Анализ дифракционных спектров позволяет определять амплитуды акустических волн (рис. 1) и углы сноса потока акустической энергии, а использование эффекта Тальбота позволяет визуализировать акустические волновые поля на поверхности кристаллов в режиме реального времени [3]. Продемонстрировано что упорядоченные и разупорядоченных кристаллы различаются как величинами пьезоэлектрических модулей, так и скоростями поверхностных и псевдоповерхностных акустических волн.

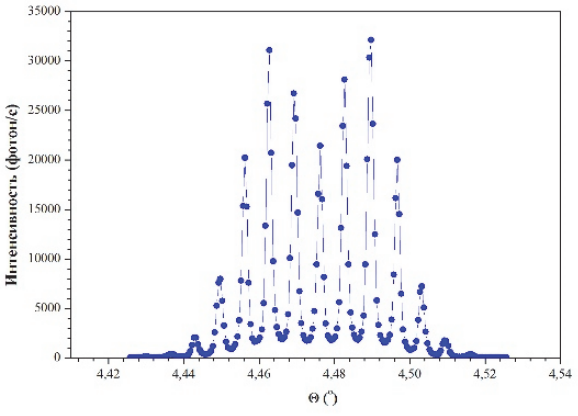


Рис.1. Кривая качания Y-среза кристалла $Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$, промодулированного ПАВ с длиной волны Λ=6 мкм.

[1] Irzhak D., Roshchupkin D. // AIP Advances, 2013, vol. 3, p. 102108(7).

[2] Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., et al. // J. Appl. Phys., 2003, vol. 94, p. 6692-6696.

[3] Roshchupkin D., Ortega L., et al. // Appl. Phys. Lett., 2013, vol 103, p. 154101(3).

ПОЛАЯ МИКРОТРУБКА ТЕЛЛУРА - ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЭЛЕМЕНТ ДЛЯ ГАЗОВЫХ ДАТЧИКОВ

Исмаилов А.М., Рабаданов М.Х., Шапиев И.М., Алиев И.Ш.
ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет»
e-mail: egdada@mail.ru

Тонкие пленки теллура давно исследуются с целью изготовления на их базе датчиков, чувствительных к различным газам (NO_2, CO_2, NH_3, H_2S и др.). В ряде публикаций [1] описываются попытки создания газовых датчиков на основе одиночных нитевидных кристаллов (НК) теллура, представляющие собой лабораторные образцы, конструкции которых далеки от промышленной реализации. Ожидается, что по ключевым параметрам датчики, построенные на базе одиночного НК Т.е. будут намного превосходить тонкопленочные аналоги.

В данной работе сообщается о разработке технологии получения полых НК (микротрубок) теллура и предлагается их использовать в качестве высокочувствительных элементов при изготовлении газовых датчиков. НК теллура получены методом термохимической активации [2]. Данный метод обладает возможностями регулирования пересыщения в системе в широких пределах за счет изменения технологических параметров роста. Это и позволило выбрать оптимальные технологические режимы синтеза микротрубок Te с заданными геометрическими размерами: длина, диаметр, толщина стенок микротрубки (рис.1). Характерные размеры вискеров: диаметр – 1-100 мкм, длина 10 мкм -1см, толщина стенки 1-5 мкм. Скорость роста вискеров Te доходит до 200 мкм/мин.

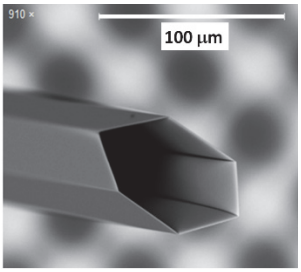


Рис.1. РЭМ-изображение торца полой микротрубки теллура.

Увеличение удельной площади поверхности чувствительного элемента датчика имеет решающее значение для создания высокочувствительных газовых сенсоров. Поэтому, получаемая по нашей технологии полая структура НК теллура позволит адсорбировать молекулы газа как внутри, так и снаружи поверхности микротрубки, значительно увеличивая полезную удельную площадь поверхности чувствительного элемента. Кроме того, толщина стенок микротрубки теллура составляет величину порядка 1 мкм. Указанные выше особенности позволят значительно увеличить ключевые параметры сенсора (чувствительность, быстродействие, время восстановления).

[1] L. Guan et al. // Sensors and Actuators, 2014, vol. 196, p. 321-327

[2] Исмаилов А.М. и др. Письма в ЖТФ, 2015, том 41, вып. 2, с. 64-69.

ИЗУЧЕНИЕ ВОДНО-СОЛЕВЫХ РОСТОВЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОТОНПРОВОДЯЩИХ КРИСТАЛЛОВ

Коморников В.А., Гребенев В.В., Макарова И.П., Селезнева Е.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
v.a.kom@mail.ru

Ионные материалы являются неотъемлемой частью современной техники и технологии. Среди ионных проводников можно выделить подсемейство материалов, называемых суперпротониками, примером которых могут служить кристаллы семейства $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2}\cdot xH_2O$ (M = NH_4, K, Rb, Cs; A= S, Se, P, As). Особенностью этих соединений являются структурные фазовые переходы при температурах, предшествующих плавлению.

Проведено изучение сложных водно-солевых ростовых систем: $CsHSO_4$ – CsH_2PO_4 – H_2O [1-3], $Rb_3H(SO_4)_2$ – RbH_2PO_4 – H_2O [2,3] и $K_3H(SO_4)_2$ – $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ – H_2O [4,5] с целью получения новых функциональных материалов. Выбор ростовых систем проводился на основании анализа имеющихся данных о свойствах и структуре соединений кристаллического семейства $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2}\cdot xH_2O$. Модификация свойств исходных соединений с применением методов катионного и анионного замещения является перспективным и инновационным подходом к исследованию.

В результате исследования водно-солевых систем определены условия воспроизводимого получения новых соединений и материалов, выращены крупные монокристаллы, решены их структуры и исследованы физико-химические свойства.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ № СП-1445.2016.1.

[1] Makarova I., Grebenev V. et.al // Acta Cryst. B, 2016, V. 72, p. 133.

[2] Коморников В.А., Гребенев В.В. и др.// Кристаллография, 2015, том 60, № 3, с. 481.

[3] Коморников В.А., Гребенев В.В. и др.// Кристаллография, 2016, том 61, № 4, с. 648.

[4] Дмитричева Е.В., Макарова И.П. и др. // Кристаллография, 2015, том 60, №6, с. 880.

[5] Dmitricheva E., Makarova I. et al. // Solid State Ionics, 2014, V. 268, p. 68.

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЯ НА ПРОЦЕСС ПОЛЯРИЗАЦИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПОЛИМЕРА ВИНИЛИДЕНФТОРИДА ПО ДАННЫМ МЕТОДА СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ПЬЕЗООТКЛИКА

Кочервинский В.В.[1], Киселев Д.А[2], Малинкович М.Д.[2],
Калабухова А.В.[3], Градова М.А.[4]
[1]АО НИФХИ им. Л.Я. Карпова
[2]НИТУ МИСиС
[3]МТУ
[4]ИХФ РАН
e-mail: kochval@mail.ru

В настоящей работе использован гидрофильный катионный краситель аминоксантенового ряда родамин С (RhC), который вводился в полимерную сегнетоэлектрическую матрицу. В качестве сегнетоэлектрического материала использовался сополимер винилиденфторида ВДФ с тетрафторэтиленом (ТФЭ) состава 71/29 с повышенной гидрофобностью за счет высокой доли в нем ТФЭ, доменная структура которого исследована ранее. Введение красителя в полимерную матрицу осуществлялось из общего растворителя (ацетона) при формировании пленки путем медленного удаления последнего. Низковольтные измерения электрических характеристик в диапозоне 25 Гц-1 МГц проводили при комнатной температуре с помощью измерителя имитанса. Высоковольтная поляризация и проводимость измерялась на модифицированной установке, собранной по схеме Сойера-Тауэра. Согласно данным последнего метода заряженные молекулы красителя, находясь в аморфной фазе, могут локализоваться на заряженных поверхностях полярных кристаллов. Это подтверждается появлением особенностей токов переключения именно в окрашенных пленках, в то время как в пленках без красителя при тех же полях их не наблюдается. В этих же пленках доменная структура исследована методом силовой микроскопии пьезоотклика. Были исследованы образцы как без красителя, так и с таковым при различной его концентрации. Остаточная поляризация наблюдалась после процесса локальной поляризации поверхности пленок постоянным напряжением: -35 В (светлый квадрат – 7×7 мкм^2) и +35 В (темный квадрат 4×4 мкм^2). На рис.1а приведены изображения сигнала остаточного пьезоотклика пленки с красителем после поляризации. Для оценки величины сигнала остаточного пьезоотклика и ее зависимости от концентрации красителя в образце F42-B, нами предложена следующая схема ее расчета. В качестве примера рассмотрим заполяризованную область для образца F42-B+1%RodC (рис 1а). Профиль сигнала остаточного пьезоотклика, проведенный посередине скана представлен на рис 1. Величина сигнала ΔPR рассчитывается как средняя «высота» между заполяризованными областями положительным и отрицательным напряжением – указано стрелкой на рис. 1б. Следуя этому рисунку, для образца сополимера с 1%RhC значение ΔPR составило ~ 7 нА. Аналогично проанализированы образцы с другой концентрацией красителя. Результаты представлены в таблице 1. Как видно из табличных данных с ростом содержания красителя повышается и значение ΔPR приходится образец с максимальным содержанием красителя B+1%RodC, и далее с уменьшением концентрации красителя величина ΔPR также уменьшается. Ранее было показано, что в рассматриваемом сополимере высоковольтная поляризация после снятия поля характеризуется малым временем релаксации.

(а) (б)

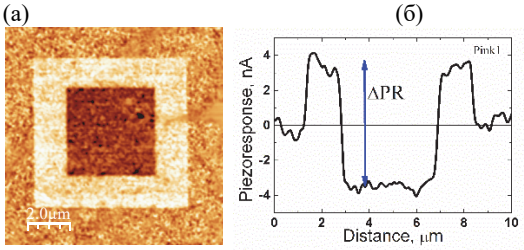


Рис.1. Изображения сигнала остаточного пьезоотклика пленки с красителем после поляризации (а) и профиль сигнала остаточного пьезоотклика (б).

Таблица 1.

% красителя	ΔPR, нА
0	2.4±0.6
0.002%RhC	3.6±0.5
0.02%RhC	4.5±0.5
1%RhC	7.1±0,5

МЕХАНИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЗОВАННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ

Неъматов М.Г.[1], Юданов Н.А.[1], Евстигнеева С.А.[1],
Морченко А.Т.[1], Панина Л.В.[1,2], Костишин В.Г.[1],
Чурюканова М.Н.[1], Ларин В.С.[3], Джумъазода А.[1]
[1]НИТУ «МИСиС», Москва
[2]ИППМ РАН, Москва,
[3]MFTI Ltd, Кишинев
e-mail: nmg_1988@mail.ru, dratm@mail.ru

Свойства магнитноимпедансных ферромагнитных микропроводов кардинальным образом зависят от их геометрии, внутренней структуры и внешних воздействий (температура, механические напряжения). Поэтому такие провода могут использоваться в качестве высокочувствительных датчиков магнитного поля и температуры, а также при создании встроенных систем для дистанционного мониторинга внутреннего напряженно-деформированного состояния различных конструкций. В процессе термомагнитной обработки происходит преобразование исходного аморфного состояния проводов, и они приобретают нанокристаллическую или аморфно-кристаллическую структуру.

Для выяснения влияния различных факторов на характер изменения свойств нами были изучены механические и магнитные характеристики аморфных ферромагнитных микропроводов $Fe_{4,5}Co_{67,5}B_{14}Si_{11}Cr_3$ в оболочке из стекла *PIREX* в исходном состоянии и подвергнутые кристаллизационному отжигу при разных режимах обработки. В экспериментах использовались

провода с различным соотношением диаметра металлической жилы и стеклянной оболочки.

Процессы намагничивания проводов исследовались с помощью вибрационного магнитометра, а в условиях напряжения растяжения и кручения – также индукционным методом с использованием двух дифференциальных катушек. Нагрузка прикладывалась с одного конца микропровода. Для построения петли гистерезиса индуцированный электрический сигнал оцифровывался и интегрировался как функция магнитного поля. Представлены результаты измерения модуля Юнга проводов в оболочке и без оболочки.

НАНОСТРУКТУРА И ФТОР-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ТИСОНИТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$

Николайчик В.И.[1,2], Соболев Б.П.[2], Сорокин Н.И.[2], Авилов А.С.[2]
[1] *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН*
[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: nikola@iptm.ru

Фтор-проводящие твердые электролиты $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ (R=La-Lu; M=Ca, Sr, Ba) со структурой типа тисонита (LaF_3) имеют рекордно высокие значения ионной проводимости при комнатной температуре. Повышение проводимости тисонитовых фаз $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ в сравнение с исходным ионным проводником LaF_3 при допировании его щелочноземельным элементом может достигать несколько порядков величин. В связи с этим, твердые электролиты $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ привлекают научный и практический интерес для создания электрохимических устройств нового поколения.

В данной работе методами электронной дифракции и элементного анализа в просвечивающем электронном микроскопе изучен фазовый состав кристаллов $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ (y=0, 0.05, 0.0725, 0.1, 0.15) с тисонитовой структурой LaF_3. В образцах с y=0.1 и 0.15 зафиксировано присутствие в тисонитовой матрице нанометровых пластинчатых включений примесной фазы с толщиной ~ 20 Å и со структурой, вероятно являющейся модификацией структуры флюорита. Установлена корреляция между уменьшением фтор-ионной проводимости в образцах $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ при увеличении содержания щелочноземельного элемента от ее максимума, имеющего место при y=0.05, и формированием нанометровых включений примесной фазы. Последние блокируют пути для движения подвижных ионов фтора в тисонитовой матрице. Тисонитовая матрица вероятно имеет кристаллическую структуру β-формы тисонита LaF_3 во всем диапазоне исследованных составов, а погасание части сверхструктурных отражений, характерных для β-формы, в образцах $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ с y= 0.1 и 0.15 обусловлено наноструктурным состоянием тисонитовой матрицы.

Работа поддержана РФФИ (проект №14-03-00178).

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В CDTE МЕТОДАМИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА (ДТА) И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ (ДСК).

Павлюк М.Д.[1], Волчков И.С.[1], Зыкова М.П.[2], Гребенев В.В.[1], Ополченцев А.М.[1], Колымагин А.Б.[1], Каневский В.М.[1]
[1] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2] *РХТУ им. Д.И. Менделеева*
e-mail: zenkova@crys.ras.ru

Полупроводниковое соединение CdTe обладает уникальными фотопроводящими свойствами, вызванными высокой чувствительностью этого материала к различным видам излучения. Ограничение в его использовании вызвано большой сложностью получения совершенных монокристаллов с воспроизводимыми характеристиками.

Этот важный полупроводниковый материал интенсивно исследуется в течение последних пяти десятилетий и насчитывает тысячи публикаций в научной литературе. Однако результаты исследований имеют противоречивый характер, и каждый автор приводит свои очертания границы области существования твердого соединения.

Цель работы – получение достоверной информации о твердофазных превращениях CdTe.

В этой работе, твердотельные превращения, происходящие в CdTe были обнаружены и изучены двумя независимыми методами ДТА и ДСК при различных температурах. Были зафиксированы фазовые переходы при T = 993-1013 K, T = 1153-1168 K и T = 1233-1253 K, и определены их тепловые эффекты: $_{\Delta}H_{1013\text{-}1023\ K} \approx 120$ Дж / моль, $_{\Delta}H_{1133\text{-}\ 1153\ K} \approx 160$ Дж / моль, и $_{\Delta}H_{1273\text{-}1293\ K} \approx 415$ Дж / моль. Фазовая диаграмма CdTe предложенная ранее [1] была подтверждена.

[1] Ivanov Yu. M. // Russ. J. of Inorg. Chem., 2014, том 59, № 14, с.1705.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЛОКАЛЬНОГО АНОДНОГО ОКИСЛЕНИЯ КРЕМНИЯ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПРОФИЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР ЭЛЕМЕНТОВ ЛАБОРАТОРИЙ НА КРИСТАЛЛЕ

Полякова В.В., Смирнов В.А., Поляков В.В.
Южный федеральный университет
e-mail: vik5702935@yandex.ru

Кремний (Si) один из перспективных материалов микро- и наноэлектроники, а также это биосовместимый материал, который может быть использован для создания элементов лабораторий на кристалле (Lab on Chip). Основным методом формирования элементов микрофлюидики является фотолитография. Однако, в связи с уменьшением размера элементов, она требует использование дорогостоящего оборудования, специализированных источников света и сложных шаблонов. Альтернативой существующим методам литографии является локальное анодное окисление(ЛАО) с использованием атомно силового микроскопа(АСМ), но для создания элементов лабораторий на кристалле необходимо детальное исследование режимов формирования оксидных наноразмерных и профилированых структур на поверхности Si.

На первом этапе с помощью зондовой нанолаборатории Ntegra на подложки Si формировались матрицы оксидных наноразмерных структур(ОНС) при различных технологических параметрах. На втором этапе полученные ОНС Si стравливались в плавиковой кислоте(HF) для получения профилированных наноразмерных структур(ПНС) Si. По полученным результатам были построены зависимости высоты и диаметра полученных ОНС и ПНС структур при различной влажности и напряжения приложенного в системе зонд подложка.

Анализ полученных зависимостей показал, что при напряжении 15В и относительной влажности 70±1% высота и ширина ОНС составляет 1,5±0,5нм и 390±30нм, соответственно. После травления полученных ОНС в HF глубина и диаметр составили 1±0,5нм и 390±25нм соответственно. С использованием полученных режимов был сформирован макет элемента лаборатории на кристалле с размером канала 2500±25нм. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и формировании структур элементов Lab on chip с использованием зондовых нанотехнологий.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АЛМАЗА: ТЕХНОЛОГИЯ И СВОЙСТВА

Ральченко В.Г.[1,2,3], Большаков А.П.[1,2], Седов В.С.[1,2], Юров В.Ю.[1,2], Совык Д.Н.[1,2], Пашинин В.П.[1], Кононенко Т.В.[1], Конов В.И.[1,2]

[1] Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

[2] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[3] Харбинский технологический университет

e-mail: vg_ralchenko@mail.ru

Алмаз, обладающий уникальным сочетанием многих ценных свойств, в том числе рекордных среди прочих материалов, представляет большой интерес для использования в качестве радиационно-стойких детекторов ионизирующего излучения, мониторов синхротронного излучения, ВКР-лазеров, оптики мощных ИК лазеров, теплоотводящих элементов в электронных приборах, источников однофотонного излучения для информационных технологий. Синтез алмаза из газовой фазы (chemical vapor deposition - CVD) позволяет выращивать поликристаллические пленки и пластины большого диаметра (> 50 mm) и особо чистые монокристаллы с экономически привлекательными скоростями (порядка 100 мкм/час). В докладе будут рассмотрены метод синтеза алмаза в СВЧ плазме в смесях метан-водород на Российском оборудовании [1], способы создания центров окраски, в частности, кремний-вакансия (SiV) в процессе роста [2], обработки поверхности пленок и кристаллов. Представлены данные от теплопроводности, оптических свойствах, примесном составе, реальной структуре CVD алмаза.

Применения CVD алмазов будут проиллюстрированы на нескольких примерах. Создан наносекундный лазер на вынужденном комбинационном рассеянии в алмазе с генерацией на 1-м и 2-м Стоксе (длины волн 1240 нм и 1485 нм) [3]. Разработаны прототипы УФ детекторов и детекторов частиц высоких энергий в монокристаллах алмаза с трехмерной геометрией электродов [4]. Прецизионной резкой фемтосекундным лазером получены рефрактивные алмазные линзы для фокусировки синхротронного рентгеновского излучения [5]. Испытаны водоохлаждаемые поликристаллические алмазные окна для мощных технологических непрерывных ИК лазеров. Будут представлены новые результаты по созданию фотонных кристаллов из алмаза с использованием темплатов из опаловых матриц [6]. Часть работ в области поликристаллических пленок выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, соглашение № 14.613.21.0021 о предоставлении субсидии, уникальный идентификатор научных исследований RFMEFI61314X0021.

[1] Bolshakov A.P., Ralchenko V.G., Yurov V.Y. et al. // Diamond Relat. Mater. 2016, Vol. 62, pp. 49-57.

[2] Bolshakov A., Ralchenko V., Sedov V. et al. // Physica Stat. Sol. (a), 2015, Vol. 212, No. 11, pp. 2525-2532.

[3] Pashinin, V.P., Ralchenko, V.G., Bolshakov A.P. et al. // Laser Phys. Lett. 2016, Vol. 13, No. 6, p.065001.

[4] Kononenko, T., Ralchenko, V., Bolshakov A. et al. // Appl. Phys. A, 2014, Vol. 114, No.2, pp. 297-300.

[5] Kononenko T.V., Ralchenko V.G., Ashkinazi E.E. et al. // Appl. Phys. A, 2016, Vol. 122, No. 3, pp.1-6.

[6] Dai B., Shu G., Ralchenko V. et al. // Diamond Relat. Mater. 2016 (in press).

ФОРМИРОВАНИЕ ЛАЗЕРОИНДУЦИРОВАННЫХ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СТРУКТУР В ПЛЕНКАХ ПОЛИБЕНЗИМИДАЗОЛА

Рыбалтовский А.О.[1], Аковацева А.А.[2], Тимашев П.С.[2,3], Юсупов В.И.[2]

[1]МГУ имени М.В. Ломоносова

[2]ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[3]МГМУ имени И.М. Сеченова

e-mail: akovantseva-a@yandex.ru

Создание устойчивых люминесцентных структур в твердых прозрачных материалах происходит, как правило, путем введения редкоземельных ионов [1] или полупроводниковых наночастиц [2] с дальнейшим использованием определенных физико-химических процессов их осаждения. Подобные структуры составляют основу ряда электронных и сенсорных устройств, а в последнее время находят применение и в биомедицинских технологиях [3,4]. Имеются сведения о создании лазероиндуцированных люминесцентных структур на основе нанокластеров серебра и золота в полимерных матрицах, которые могут найти применение для записи информации и в биомедицине [5,6]. Однако, случаев лазероиндуцированного формирования люминесцирующих структур в чистых беспримесных материалах до сих пор не было известно. Такие структуры, прежде всего, представляют интерес с точки зрения исследования механизмов проявления люминесцентных процессов в системах с близкорасположенными центрами свечения и в дальнейшем могут найти применение для создания сенсорных устройств и в дефектоскопии.

Целью настоящей работы явилось создание люминесцентных структур в полимерных пленках поли-2,2'-*n*-оксидифенилен-5,5'-бибензимидазола (ОПБИ) при воздействии на них непрерывного лазерного излучения с длиной волны 405нм. Выбор ОПБИ был определен наличием собственной люминесценции и способностью сохранять гибкость и механическую прочность при температурах выше 400°С. В отлитых пленках были созданы лазероиндуцированные люминесцентные структуры. Методами оптической и атомно-силовой микроскопии установлена морфология полученных структур. Показана зависимость люминесценции полимера от лазерного и термического воздействия.

[1] Гапоненко Н.В. // Мн., Бел. Наука, 2003.

[2] Dirr S., Wiese S., .Johannes H.-H // Synthetic metals, 1999, V.91, N1-3, P.53-56.

[3] Boraban A.P, .Dmitriev V.A, Gadzhalo A. // Rus. Phys. J. 2014, V.57, N5, P.627.

[4] Ищенко А.А., Фетисов Г.В., Асланов Л.А. // Москва, Физматлит, 2014.

[5] Lin C.-A.J., Lee C.-H., Hsieh J.-T. et al. // J.of Med. and Biolog. Engineering, 2009, V.29, P. 276-283.

[6] Kunwar P., Hassinen J., Bautista G. et al. // ACS Nano, 2014, V.8, P.11165-11171.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ GAAS, КОМПЕНСИРОВАННОГО ГЛУБОКИМИ НАНОКЛАСТЕРАМИ

Толбанов О.П.

Научно-исследовательский Томский государственный университет

Введение легирующих добавок может эффективно влиять на состояние ансамбля собственных точечных дефектов в кристаллах, на особенности поведения в них дислокаций и сопутствующих примесей, что в конечном итоге может привести к существенному расширению возможностей управляемого воздействия на свойства полупроводникового материала и структур на его основе. Так, легирование мелкими примесями управляемо регулирует тип проводимости и концентрацию носителей заряда в полупроводнике, что эффективно используется в полупроводниковом приборостроении. Существенные изменения свойств материалов наблюдаются при легировании нетрадиционными примесями, образующими глубокие уровни в запрещенной зоне, что позволяет воздействовать на время жизни носителей заряда и регулировать степень компенсации электрически активных центров. Можно предположить, что в ближайшем будущем всё большее значение будут приобретать методы сложного легирования с использованием как традиционных, так и нетрадиционных легирующих примесей. В данной работе, на примере арсенида галлия, компенсированного примесями с глубокими уровнями, показана роль глубоких центров в изменении свойств материала и структур на его основе. Примером таких примесей являются переходные элементы группы железа в A^3B^5, создающие в запрещенной зоне кристалла состояния, во многом определяемые атомными d- или f-состояниями примеси. Однозначно установлено, что 3d-примеси переходной группы Fe (Fe, Cr) в A^3B^5 растворяются в узлах подрешетки A^3 и являются глубокими акцепторами.

Применение полупроводниковых материалов с d-примесями (GaAs<Cr>, GaAs<Fe>) в твердотельной электронике базируется на двух специфических эффектах. Первый эффект связан с компенсацией. Если в A^3B^5 имеются фоновые донорные ($N_{d\phi}$) и акцепторные примеси ($N_{a\phi}$) и легирующие мелкие донорные (N_d) и глубокие акцепторные (N_t) примеси в соотношении: $N_t>N_d>(N_{d\phi}-N_{a\phi})$, фоновые примеси частично компенсируют друг друга, а электроны от оставшихся фоновых и мелких доноров компенсируют уровни узельных d-примесей. Например, в системе GaAs<Cr>, Cr диффундирует как межузельный атом. Встреча с вакансией галлия $Cr_i+V_{Ga}\rightarrow Cr_{Ga}$ закрепляет хром в галлиевом узле с тетраэдрическим окружением мышьяковых лигандов. Каждый атом галлия в GaAs должен отдать три внешних электрона (состояние свободного атома галлия $4s^2 4p^1$) на образование связи. Поэтому по сравнению с конфигурацией $3d^5 4s^1$ для свободного атома Cr ион Cr_{Ga} имеет структуру $3d^3$ и это соответствует его «нейтральному» состоянию. Электроны в компенсированных d-атомах Cr приобретают электронную структуру $3d^4$, что соответствует «отрицательно» заряженному состоянию примеси Cr. Оставшиеся нескомпенсированные атомы Cr по-прежнему будут в состоянии $3d^3$. Именно они будут поставлять дырки в валентную зону, но концентрация дырок будет мала из-за большой энергии ионизации, $(E_{Cr}-E_v)$~0,76 eV, d-атомов. Аналогичную картину мы будем иметь и для системы GaAs<Fe>, $(E_{Fe}-E_v)$~0,5 eV. Следовательно, материал с таким двойным легированием будет чрезвычайно высокоомным. Следует разделить два случая. Первый - $N_t>N_d>(N_{d\phi}-N_{a\phi})$, - при котором высокоомный слой будет иметь p-тип проводимости, и второй – $N_d>N_t>(N_{d\phi}-N_{a\phi})$, - при котором электроны с донорных центров полностью компенсируют уровни узельных d-примесей и высокоомный слой имеет n-тип проводимости.

Второй эффект связан со случайным характером распределения атомов примесей в кристалле. Так как в единой термодинамической системе (кристалле) уровень химического потенциала выравнивается, то зонная картина приобретает гофрированный вид. В результате электроны и дырки в своих зонах оказываются пространственно разделёнными. Поскольку их рекомбинация непрямым переходом затруднена, то они в таком неравновесном состоянии будут находиться долго, пока принудительным образом их не перевести для прямой рекомбинации. Время жизни неравновесных носителей (τ) увеличивается по закону: $\tau=\tau_o\cdot\exp(\Delta E/kT)$, где τ_o- время жизни в материале до легирования; ΔE-среднее значение высоты барьера для рекомбинации. Эффект гигантского увеличения времени жизни может наблюдаться лишь в материале сильно легированном и одновременно сильно компенсированном. Так в системе GaAs<Te,Cr> величина $\Delta E\cong 0{,}15$ эВ, и время жизни при 300К возрастает до ~ 0,1-1 мкс.

Варьируя типом легирующих примесей, а также уровнем легирования и градиентом концентрации примесей можно в широких пределах изменять электрофизические характеристики и свойства высокоомных слоёв. Например, возможно понижение электропроводности GaAs до

величины меньшей «собственной» и увеличение времени жизни до 0,1 мкс. Это обстоятельство может быть использовано для создания полупроводниковых структур и приборов с новыми свойствами.

Разработка и исследование многослойных структур, электронные свойства которых определяют примеси с глубокими уровнями (d-примеси в GaAs), открывает перспективы использования их для создания чувствительных элементов различного назначения и устройств функциональной электроники. Многообразие электронных свойств, наблюдаемых в исследуемых структурах и ожидаемых на этом перспективном научном направлении, связано, прежде всего, с изменением зарядового состояния глубоких примесных центров. Управление процессом перезарядки глубоких примесных центров позволит в будущем создавать элементную базу микро- опто- и функциональной электроники, превосходящую по совокупности параметров известные аналоги.

Структуры имеют высокую чувствительность к различным внешним воздействиям, что используется нами при создании квантово-чувствительных сенсоров, а увеличение времени жизни открывает возможности создания ячеек памяти ЭВМ нового поколения, в которых запись сигнала задаётся светом с $h\nu \geq E_g$, а его стирание – светом с $h\nu \geq \Delta E$. Изменение зарядового состояния глубоких центров в пределах области пространственного заряда электронно-дырочного перехода и формирование в высоких электрических полях волн ударной ионизации, - перспективны для разработки элементов функциональной и силовой импульсной электроники.

С использованием высокоомных структур из арсенида галлия, компенсированного Fe, Cr, создана серия оригинальных полупроводниковых приборов, по совокупности основных параметров превышающая известные аналоги: сверхбыстрые электронные ключи, фотоприёмники и детекторы ионизирующих излучений.

Разработаны и созданы промышленные образцы электронных управляемых ключей, S–диодов и S–диодов с управляющим электродом, используемых в силовой импульсной технике для формирования больших перепадов напряжения до 1 кВ и силы тока до 100А за время (40–200) пс, и частотой срабатывания до 1 МГц. Приборы работоспособны в качестве формирователей в режиме пассивного релаксатора и режиме обострения.

Разработаны фотоприёмные элементы видимого и УФ диапазонов спектра с пороговой чувствительностью в спектральном диапазоне (0,2–0,4) мкм достигающей (10^{-15}) Вт/Гц$^{1/2}$.

В коллаборации с мировыми лидерами в области экспериментов на коллайдерах (LHC, ILC и др.) и с синхротронным излучением (DESY, ESRF, PSI, RAL, BNL, JINP и др.) в ТГУ ведутся разработки матричных детекторов большой площади, 84,6x28,2 мм^2, с числом элементов до 1 миллиона пикселей для регистрации единичных квантов синхротронного излучения, в экспериментальной физике высоких энергий, в системах формирования цифрового цветового изображения в рентгеновских и гамма лучах медицинского, научного и промышленного назначения.

КРИСТАЛЛЫ С ЭФФЕКТОМ ЭЛЕКТРОХИРАЛЬНОСТИ – НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРООПТИКИ

Хышов А.А.[1], Новиков М.А.[1], Степанов А.А.[2], Бакунов М.И.[2]
[1] Институт физики микроструктур РАН
[2] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
e-mail: khysh@ipmras.ru

В докладе рассматриваются перспективы использования кристаллов с эффектом электрохиральности (электрогирации) как материалов для электрооптики. Показано, что для создания электрооптических приборов наибольший интерес представляют электрохиральные кристаллы с центром симметрии, в которых отсутствуют конкурирующие эффекты – естественная хиральность, эффект Поккельса и обратный пьезоэффект. На основе таких кристаллов могут быть созданы быстродействующие оптические модуляторы, а также электросенсоры для диагностики быстропротекающих процессов в электросетях, вызванных ударами молнии и переключениями. В качестве примера электрохиральных кристаллов с центром симметрии мы рассматриваем кристалл вольфрамата свинца ($PbWO_4$, группа симметрии 4/m). Поскольку кристаллы $PbWO_4$ широко применяются как сенсорные элементы для сцинтилляционных счетчиков на ускорителях элементарных частиц, то в России освоена промышленная технология выращивания и обработки этих кристаллов оптического качества и больших размеров. Кристалл $PbWO_4$ обладает хорошими механическими и оптическими свойствами, а также высоким напряжением пробоя, химически устойчив. В докладе приводятся результаты экспериментального исследования дисперсии электрохиральности в кристалле $PbWO_4$ и рассматривается возможность создания на его основе быстродействующих электрохиральных дистанционных оптоволоконных приборов для высоковольтных электросетей. Работа поддержана Минобрнауки РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы» (соглашение № 14.578.21.0041 от 21.08.2014 г., уникальный идентификатор: RFMEFI57814X0041).

ОПЫТ ВЫРАЩИВАНИЯ СОВЕРШЕННЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ ГРАНАТА

Бузанов О.А.[1], Федоров А.А.[2], Досовицкий Г.А.[3], Досовицкий А.Е.[4], Коржик М.В.[5], Васильев В.Б.[1]

[1] ОАО «Фомос-Материалс»

[2] НПООО «РИИНК»

[3] ФГУП «ИРЕА», НИЦ «Курчатовский институт»

[4] ЗАО «НеоХим»

[5] НИИ Ядерных Проблем БГУ

e-mail: george.dos@gmail.com

Сцинтилляционные монокристаллы состава $Gd_3Ga_3Al_2O_{12}$:Ce (ГГАГ:Ce) являются перспективным материалом для систем медицинской визуализации. Данная работа посвящена росту данных монокристаллов.

Исходная шихта для выращивания кристаллов ГГАГ:Ce была получена методом твердофазного синтеза из оксидов Gd, Ga, Al и Ce с чистотой не хуже 99,99% (4N). Смешение компонентов, взятых в соответствии со стехиометрическим составом $Gd_3Ga_3Al_2O_{12}$:Ce проводили в установке виброкипящего слоя.

Рост кристаллов ГГАГ:Ce осуществляли методом Чохральского с индукционным способом нагревом иридиевого тигля на модернизированной установке Кристал-3м. Расплавление исходной шихты и рост кристаллов проводили в защитной атмосфере аргона с добавлением небольшого количества кислорода. После выращивания кристаллы подвергали высокотемпературному воздушному отжигу при температуре 1200 °C в течении 24 часов.

Были получены кристаллы ГГАГ:Ce весом более 800 г, при диаметре цилиндрической части не менее 46 мм и длине не менее 120 мм (Рис. 1). Применение описанной выше комбинации способов подготовки шихты, выращивания и температурной обработки кристаллов позволило получить кристаллы прозрачные по всему объему, не имеющие трещин, других видимых дефектов, а также центров рассеяния при наблюдении в луче He-Ne лазера. Полученные монокристаллы продемонстрировали высокий световыход и хорошую кинетику затухания при облучении различными гамма-источниками.

Рис.1. Буля монокристалла ГГАГ:Ce.

ПОЛУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКИ СТАБИЛЬНЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ЦИНКА МЕТОДОМ ИОННО-СТИМУЛИРОВАННОГО ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Вакулов З.Е., Замбург Е.Г., Агеев О.А.

Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения, Южный Федеральный Университет

e-mail: zvakulov@sfedu.ru

В настоящее время задача получения нанокристаллических пленок ZnO с термически стабильными параметрами в диапазоне рабочих температур (20 – 300) ºС является актуальной задачей при изготовлении чувствительных элементов устройств наносенсорики и микросистемной техники. Одним из наиболее перспективных методов получения нанокристаллических пленок является метод ионно-стимулированного импульсного лазерного осаждения (ИЛО) [1]. Целью работы является экспериментальное исследование влияния режимов стимуляции ионами Ar на морфологию и термическую стабильность сопротивления нанокристаллических пленок ZnO, полученных методом импульсного лазерного осаждения.

Для оценки стабильности зависимости сопротивления наноструктурированных пленок ZnO при нагреве-охлаждении использовалось относительное изменение сопротивления пленки при температуре 50 °C в начале второго цикла нагрева и в конце третьего цикла охлаждения. Для пленки, полученной без ионной стимуляции, значение параметра составило 0,8 для пленки, полученной при потоке ионизируемого газа 2 $см^3$/мин, значение параметра составило 0,99.

Использование ионной стимуляции при ИЛО позволяет улучшить термическую стабильность их электрофизических свойств по сравнению с пленками, полученными без ионной стимуляции. Экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что ионная стимуляция при ИЛО позволяет формировать пленки со стабильными электрофизическими свойствами пригодными для приборного применения в широком диапазоне температур (20 – 300)ºС. Результаты могут быть использованы для разработки перспективной элементной базы микросенсорики.

[1] Ageev O.A., Dostanko A.P., et al. // Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2014, Vol. 50, № 5 p. 371-376.

ВЫРАЩИВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОАКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ $Tm_2Te_5O_{13}$

Виноградов А.В.[1], Волковский Ю.А.[1,2], Ломонов В.А.[1], Писаревский Ю.В.[1,2], Просеков П.А.[1,2]

[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

[2] НИЦ "Курчатовский Институт", Москва

e-mail: avin99@mail.ru

Парателлурит является популярным широко используемым акустооптическим материалом. Большое содержание теллура и диэлектрические характеристики, также, привели к использованию этих кристаллов для создания детекторов двойного бета-распада.

Недавно были синтезированы кристаллы на основе смеси диоксида теллура и оксидов редкоземельных элементов. Это на наш взгляд открывает новые возможности для разработки разнообразных детекторов.

В настоящей работе был синтезирован пентателлурат туллия ($Tm_2Te_5O_{13}$), выращены монокристаллы данного соединения и исследованы рентгенодифракционные, пьезоэлектрические и упругие характеристики кристалла. Синтез осуществлялся по двухстадийной схеме. На первой стадии осуществлялся твердофазный синтез без плавления соединения. На второй – рост кристаллов из раствора в расплаве, где в качестве растворителя использовался диоксид теллура.

На рентгеновском дифрактометре с вращающимся анодом (SmartLab Rigaku 9кВт, $MoK_{\alpha 1}$) регистрировались кривые дифракционного отражения (КДО) выращенных монокристаллов $Tm_2Te_5O_{13}$. На рис. 1 представлена дифрактограмма от наиболее развитой грани, которая идентифицирована как (001). Значения полуширин (FWHM) КДО лежат в диапазоне 0.014 – 0.086º; FWHM(001) ≈ 48″, величина параметра ячейки c = 1.052 нм.

Электромеханические свойства исследовались с помощью измерителя импедансов. Были обнаружены электромеханические резонансы, с помощью которых определены несколько компонент упругих и пьезоэлектрических модулей. Результаты определяют данное соединение как сильный высокодобротный пьезоэлектрик, перспективный для разнообразных электромеханических датчиков.

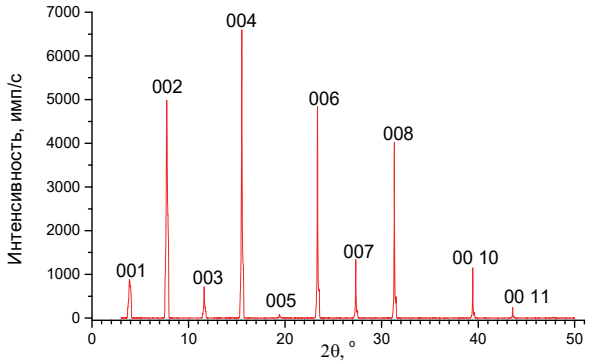


Рисунок 1 – Кривая дифракционного отражения монокристалла $Tm_2Te_5O_{13}$, отражения семейства плоскостей (001).

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-29-14057 офи_м).

[1] S F. Meier, T Schleid Z. Naturforsch. 60b, 720 – 726 (2005).

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ТРИГОНАЛЬНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ АЛЮМОБОРАТОВ

Гудим И.А.[1], Безматерных Л.Н.[1], Еремин Е.В.[1], Темеров В.Л., Волков Н.В.

[1]ФГБУН Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

[2] Сибирский федеральный университет

e-mail: irinagudim@mail.ru

В современной физике магнетизма одна из центральных проблем – магнитоэлектричество твёрдотельного вещества.

В числе экспериментально изучаемых материалов – редкоземельно-замещённые ферриты висмута, гексаферриты, манганиты, редкоземельные ферробораты[1-2]. Однако магнитоэлектричество парамагнитного состояния (парамагнитоэлектричество) по существу не изучалось.

Совсем недавно была обнаружена гигантская магнитоэлектрическая поляризация в тригональном парамагнетике со структурой изоморфной природному материалу хантиту $HoAl_3(BO_3)$[3]. Высокими значениями магнитоэлектрической поляризации характеризуются также изоструктурные ему $TmAl_3(BO_3)_4$ и $ErAl_3(BO_3)_4$[3-4].

Задача проведения комплексных исследований этого вида кристаллов может быть решена только при наличии кристаллов высокого качества и достаточных для изготовления образцов для измерений. Таким образом задача создания технологии воспроизводимого выращивания монокристаллов тригональных алюмоборатов с размерами, необходимыми для комплексного изучения их свойств, является одной из приоритетных.

Практически все кристаллы со структурой хантита плавятся инконгруэнтно. Поэтому основным способом их получения является выращивание из раствора-расплава.

В докладе будет представлен алгоритм выбора раствора-расплава, описаны параметры кристаллизации тригональной фазы для двух растворов-расплавов – на основе тримолибдата висмута и молибдата лития, и несодержащего ионов Bi на основе вольфрамата лития. Оценено влияния условий роста на двойникование.

[1] Yu.F. Popov et al. Ferroelectrics (1995) 169, 85.

[2] Кадомцева А.М. и др. ЖЭТФ (2008) 133, 156.

[3] R. P. Chaudhury et al. Phys. Rev. B (2010) 81, 220402.

[4] K.-C. Liang, and al. Phys. Rev. B (2011) 83, 180417(R).

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ ДИКАРБОКСИЛАТОВ ТРИФЕНИЛВИСМУТА

Гусаковская А.А., Калистратова О.С., Андреев П.В., Гущин А.В., Сомов Н.В., Чупрунов Е.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

e-mail: eliss_ag@mail.ru

Бис(3-фурилакрилат) трифенилвисмута и ди-*м*-нитроциннамат трифенилвисмута были получены по известной методике окислительного присоединения по схеме [1]:

$(C_6H_5)_3Bi + 2RCH{=}CHCOOH + (CH_3)_3COOH \rightarrow (C_6H_5)_3Bi(OC(O)CH{=}CHR)_2 + (CH_3)_3COH + H_2O$,

где R = C_4H_3O, *м*-NO_2–C_6H_4.

Вещества были синтезированы в тетрагидрофуране при комнатной температуре в одну стадию. После получения продукты были очищены перекристаллизацией из системы гексан – хлороформ (4:1), выходы продуктов составили 68% и 71% соответственно.

Монокристаллы бис(3-фурилакрилата) трифенилвисмута получали методом замены растворителей из тетрагидрофурана и петролейного эфира, в случае ди-*м*-нитроциннамата трифенилвисмута – из синтеза. Структурный анализ монокристаллов бис(3-фурилакрилата) трифенилвисмута и ди-*м*-нитроциннамата трифенилвисмута был проведен на дифрактометре Rigaku XTALab PRO MM003, оснащенном HPAD–детектором Pilatus 200K.

В результате рентгеноструктурного анализа определено, что бис(3-фурилакрилат) трифенилвисмута кристаллизуется в пространственной группе $P\bar{1}$, параметры ячейки составляют: a = 10.6523(8) Å, b = 12.4657(5) Å, c = 12.4967(4) Å, α = 88.025(3)°, β = 81.125(5)°, γ = 89.420(2)°. Ди-*м*-нитроциннамат трифенилвисмута кристаллизуется в пространственной группе $P2_1$, параметры ячейки составляют a = 8.7412(4) Å, b = 18.2340(8) Å, c = 13.0050(6) Å, β = 101.564(5)°, α = γ = 90°.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-33-00752 мол_а).

[1] Гущин А.В. Дисс. докт. хим. наук, ННГУ. Н. Новгород. 1998. 283с.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ $K_2Co(SO_4)_2{\times}6H_2O$ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНИКИ АКСИАЛЬНЫХ НИЗКОЧАСТОТНЫХ ВИБРАЦИЙ

Дубовенко Е.В.[1], Ермоченков И.М.[1], Садовский А.П.[2], Аветисов И.Х.[1]

[1] РХТУ им. Д.И. Менделеева, кафедра «Химии и технологии кристаллов»

[2] ООО НТО «ИРЭ - Полюс»

e-mail: ermochenkov_i_m@mail.ru

Методы выращивания кристаллов из растворов обладают такими преимуществами как высокая энергоэффективность и относительная простота ростовой системы, но низкая скорость роста делает эти метолды малопривлекательными для промышленного производства. В связи с этим проводятся интенсивные исследования по поиску методов интенсификации процесса выращивания из растворов при сохранении высокого структурного качества кристаллов. Применение техники аксиальных низкочастотных вибраций (АВН) при выращивании кристаллов методами направленной кристаллизации расплавов позволило существенно повысить как скорость роста, так и улучшить качество кристаллов [1]. Однако эффективность использования техники АНВ при выращивании кристаллов из раствора остается под вопросом [2]. Кристаллы $K_2Co(SO_4)_2{\times}6H_2O$ находят применение в качестве УФ фильтров в широком спектре приборов [3]. В связи с вышеперечисленными обстоятельствами в данной работы были выращены кристаллы $K_2Co(SO_4)_2{\times}6H_2O$ с применением АНВ. Для сравнения были выращены кристаллы стандартным методом снижения температуры [3]. Показано, что применение техники АНВ позволяет повысить объемную скорость роста в ~2 раза при снижении плотности дислокаций на разных гранях от 1 до 2 порядков. Анализ спектров пропускания показал, что АНВ-кристаллы в диапазоне 200-400 нм на 26 % более прозрачны по сравнению с традиционно выращенными кристаллами.

[1] Sadovskiy A. et al. // J. Cryst. Growth, 2015, Т. 417, С. 16-24.

[2] Barinova O. et al. // J. Cryst. Growth, (2016), http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.01.021i

[3] Маноменова В. Л., Руднева Е. Б., Волошин А. Э. // Успехи химии, 2016, том 85, с. 585-591.

НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ОКСИД ИНДИЯ ДЛЯ СЕНСОРОВ: СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА

Ильин А.С.[1,2], Мартышов М.Н.[1], Форш П.А.[1,2], Кашкаров П.К.[1,2]
[1]Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова
[2]НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: as.ilin@physics.msu.ru

Нанокристаллический оксид индия (In_2O_3) является перспективным материалом для использования в газовых сенсорах. В настоящий момент наблюдается тенденция снижения рабочих температур газовых сенсоров (вплоть до комнатной) путем использования вместо нагревательного элемента светодиодной подсветки. Для эффективного применения нанокристаллического In_2O_3 для детектирования газов в условиях подсветки необходимо детально исследовать его электрические и фотоэлектрические свойства в условиях адсорбции молекул газа и влияние на эти свойства структурных параметров образца. В работе исследовалось влияние размера нанокристаллов и площади удельной поверхности In_2O_3 на проводимость при адсорбции диоксида азота (NO_2) в темноте и при ультрафиолетовом (УФ) освещении.

Образцы нанокристаллического In_2O_3 синтезировались золь-гель методом. Анализ данных рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии показал, что синтезированные образцы характеризуются кубической модификацией кристаллического оксида индия, а размер нанокристаллов лежит в диапазоне от 7 до 40 нм. Удельная поверхность образцов, оцененная методом низкотемпературной адсорбции азота согласно модели Брунауэра-Эммета-Теллера, варьировалась в интервале 10-100 $м^2/г$.

Было показано, что с уменьшением размера нанокристаллов и увеличением удельной поверхности чувствительность In_2O_3 к NO_2 при УФ подсветке монотонно возрастает, в то время как в темноте наблюдается немонотонная зависимость. Разработана модель, объясняющая наблюдаемые изменения проводимости при адсорбции NO_2 в темноте и при освещении. Показана принципиальная возможность создания газового сенсора на основе нанокристаллического In_2O_3, детектирующего NO_2 при комнатной температуре в условиях УФ подсветки на уровне ПДК.

ВЛИЯНИЕ ИЗОТОПНОГО БЕСПОРЯДКА НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА

Инюшкин А.В.[1], Талденков А.Н.[1], Ральченко В.Г.[2], Большаков А.П.[2]
[1] НИЦ «Курчатовский институт»
[2] Институт общей физики РАН
e-mail: Inyushkin_AV@nrcki.ru

Случайное распределение изотопов элементов по узлам кристаллической решетки создает «массовый» беспорядок в кристалле и нарушает его трансляционную симметрию. Это приводит к упругому рассеянию фононов на «примесных» изотопах, что в свою очередь может сильно ограничить фононную теплопроводность κ. Величина эффекта прямо пропорциональна концентрации «примесных» изотопов и квадрату относительной разности масс изотопов. Эффект изотопического беспорядка наиболее сильно проявляется при низких температурах, когда внутренне присущие процессы рассеяния фононов становятся малоэффективными. Для алмаза наблюдается большой рост теплопроводности на 50% в почти моноизотопном материале по сравнению с кристаллом с природным составом изотопов углерода даже при комнатной температуре [1]. Это обусловлено легкой массой изотопов углерода, сильной межатомной связью в алмазе и слабым ангармонизмом его решетки. Область низких температур (T < 104 K), где теплопроводность достигает максимума и влияние изотопов очень сильное, не была исследована [2].

В настоящем докладе впервые представлены экспериментальные данные о теплопроводности κ(T) высококачественных монокристаллов алмаза с разным изотопным составом, в том числе высокообогащенного с концентрацией основного изотопа ^{12}C 99.96%, выращенных методом осаждения из газовой фазы, в широком интервале температур, включая температуры вблизи максимума. Найдено, что в максимуме при T ≈ 80 K моноизотопный алмаз имеет наивысшую теплопроводность среди всех твердых тел при любых температурах.

[1] Anthony T.R., Banholzer W.F., Fleischer J.F., Wei L., Kuo P.K., Thomas R.L., Pryor R.W.// Phys. Rev. B, 1990, vol.42, № 2, p.1104-1111.

[2] Wei L., Kuo P.K., Thomas R.L., Anthony T.R., Banholzer W.F.// Phys. Rev. Lett., 1993, vol. 70, № 24, 3764-3767.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КАРБИДА КРЕМНИЯ 6H SiC, ОБОГАЩЕННОГО ПО ИЗОТОПУ ^{28}Si

Инюшкин А.В.[1], Талденков А.Н.[1], Чумаков Н.К.[1], Якубовский А.Ю.[1], Емельянов А.В.[1], Гавва В.А.[2], Гибин А.М.[2], Мохов Е.Н.[3]

[1] НИЦ «Курчатовский институт»

[2] Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН

[3] Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН

e-mail: Inyushkin_AV@nrcki.ru

Карбид кремния (SiC) является перспективным материалом для электроники, оптоэлектроники и для будущих твердотельных квантовых технологий. Высокая теплопроводность - один из ключевых параметров кристаллов SiC. Для SiC современная теория теплопроводности предсказывает ее 20% рост при комнатной температуре [1] в моноизотопном кристалле по сравнению с кристаллом природной изотопной композиции ^{nat}SiC. Одна из целей работы состояла в экспериментальном подтверждении этого теоретического предсказания.

В настоящей работе сублимационным сэндвич-методом впервые в мире был синтезирован объемный монокристалл SiC (политип 6H) с высоким обогащением по изотопу ^{28}Si (99.993%). Впервые проведены измерения теплопроводности и намагниченности моноизотопного кристалла ^{28}SiC и кристалла сравнения ^{nat}SiC, выращенных при одинаковых условиях. Согласно нашим измерениям теплопроводность моноизотопного ^{28}SiC существенно выше, чем у ^{nat}SiC в широком интервале температур. При комнатной температуре этот «изотопический эффект» составляет 20-25%, что свидетельствует о значительном вкладе рассеяния фононов на примесных изотопах в кристалле ^{nat}SiC.

Результаты измерения намагниченности монокристаллов SiC в постоянном магнитном поле указывают на существование во всех образцах трех вкладов: ферромагнитного, диамагнитного и парамагнитного. На основе анализа температурных ($2 < T < 300$ К) и полевых ($H < 7$ Тл) зависимостей удалось разделить эти вклады и оценить концентрации спинов, находящихся в парамагнитном состоянии - $(7\text{-}10)\times10^{17}$ см$^{-3}$.

[1] Lindsay L., Broido D. A., Reinecke T. L. // Phys. Rev. B, 2013, vol. 87, № 16, 165201.

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА, РАЗМЕРА И АНИЗОТРОПИИ ФОРМЫ ЧАСТИЦ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА МЕТАЛЛОНАПОЛНЕННЫХ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ КОМПОЗИТОВ

Киселева Т.Ю.[1], Жолудев С.И.[2], Кабанов В.М.[1], Марков Г.П.[3], Новакова А.А.[1], Григорьева Т.Ф.[4]

[1]МГУ им.М.В.Ломоносова, Физический факультет,

[2] Троицкий институт сверхтовердых и новых углеродных материалов, ТИСНУМ

[3]Институт физики Земли им. О.Ю.Шмидта, РАН

[4]Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

e-mail: lavitsef@mail..ru

Уникальные физические свойства проявляются в полимерных композитных системах, в которых сформированы упорядоченные ансамбли ферромагнитных частиц. К интересным системам, демонстрирующим перспективные для магнитной сенсорики, актюаторной техники и систем позиционирования свойства относят металлополимерные композиты с большим магнетодеформационным эффектом- эффектом увеличения размеров в магнитных полях или магнитным откликом при влиянии деформации.

Достижения современных технологий целенаправленного синтеза частиц металлов и их соединений заданных составов, формы и размеров от микронного до нанометрового диапазона, как отдельно, так и непосредственно в полимерных матрицах, позволяют осуществлять дизайн функциональных структур, используя специфические свойства как частиц наполнителя, их пространственного расположения, межчастичного и межфазного взаимодействия, так и свойств стабилизирующей их полимерной матрицы.

В нашей работе синтезированы новые композитные материалы на основе полимера полиуретановой группы и частиц железа и его соединений, разного размера, формы и концентрации. Для наполнения полимерной матрицы использованы железосодержащие частицы, полученные методом термолиза солей и направленного механохимического синтеза.

Методами рентгеновской дифракции, сканирующей электронной микроскопии, мессбауэровской спектроскопии, изучения магнитных, механических и магнитомеханических свойств исследовано влияние различных структурных факторов на анизотропию свойств композитов и достижение оптимальной функциональности.

Установлено, что использование механохимического синтеза для получения частиц анизотропной формы, магнитострикционного фазового состава, формирование из них упорядоченных непрерывных цепочечных структур, при сочетании при структурировании частиц микронного и нанометрового размеров, позволяет получать полиуретановый эластичный магнитноанизотропный материал, демонстрирующий значимый магнетодеформационный эффект [1-3].

[1] Kiseleva T.Yu, , Zholudev S.I., Il'inykh I.A., Novakova A.A.//Technical Physics Letters, 2013 V.39, p. 1110

[2] Zholudev S.I., Kiseleva T.Yu. //Hyperfine Interactions , 2014 , том 226, p. 375

[3] Kiseleva, T., Zholudev, S.,et al.//*Composite Structures 2016, 138*, p. 12

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ВИСМУТА И СУРЬМЫ

Кожемякин Г.Н.[1], Паращенко А.Н.[2]
[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
[2]*Луганский государственный университет им. В. Даля*
e-mail: genakozhemyakin@mail.ru

Твердые растворы халькогенидов висмута и сурьмы являются эффективными термоэлектрическими материалами для области температур от 200 К до 500 К. Данные материалы на практике получают как методами направленной кристаллизации Бриджмена, зонной плавки и Чохральского, так и методом горячей экструзии. Применение последнего метода обеспечивает эти твердые растворы более высокими механическими свойствами, которые в основном зависят от особенности их структурного совершенства, что является предметом данного исследования.

Образцы твердых растворов *p*-типа $(Bi_2Te_3)x–(Sb_2Te_3)1 – x$ ($x \approx 0.26$ mol %) и *n*-типа $(Bi_2Se_3)x–(Bi_2Te_3)1 – x$ ($x \approx 0.06$ mol %) толщиной 2 мм вырезали на электроискровом станке из слитков диаметром 30 мм полученных методом горячей экструзии в ЗАО «Ферротек НОРД». Одну из разрезанных поверхностей шлифовали оксидом алюминия, полировали оксидом хрома и травили в 50% HNO_3. Микроструктуру изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа.

Установлено, что кристаллиты исследованных твердых растворов являются наноструктурированными. Образцы *p*-типа имели нанокристаллы размерами до 30 нм, которые группировались в более крупные размерами до 60 нм, 100 нм, 300 нм и формировали кристаллиты размерами в несколько мкм. В твердых растворах *n*-типа нанокристаллиты размерами до 60 нм образовывали волокна различной ориентации с поперечным сечением в несколько десятков нм и длиной до нескольких мкм. Между нанокристаллами в образцах обоих типов проводимости наблюдались поры размерами от десятков нм до нескольких мкм, имеющих форму, близкую к сферической. Изучена морфология микроструктуры продольного и поперечного сечений экструдированных слитков твердых растворов халькогенидов висмута и сурьмы.

КОМПОЗИЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СЕНСОРА НА НЕПОЛЯРНЫЕ РАСТВОРИТЕЛИ

Корешкова А.Н.[1], Козлов А.А.[2], Абдуллаев С.Д.[2], Карпов В.М.[2], Иванов А.В.[1], Шарипов В.Р.[1]
[1] *МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет*
[2] *МИТХТ имени М.В.Ломоносова*
e-mail: sandro-i@yandex.ru

Фотонные кристаллы, как упорядоченные структуры, в результате взаимодействия с различными аналитами изменяют свои спектральные характеристики. Аналитическим сигналом служит сдвиг максимумов спектров отражения или визуальное изменение цвета основы сенсора, что применимо в экспрессных тест-методах.

Композиционный материал на основе фотонных кристаллов из полистирольных микросфер (диаметр сфер ~170 нм) получали методом самосборки из водной суспензии на подложке с нанесенной фторопластовой текстурой, затем сверху наносили слой смеси жидкого полидиметилсилоксана (ПДМС) с отвердителем [1]. Полученный материал имеет регулярную структуру и воспроизводимые спектральные характеристики: максимумы спектров диффузного отражения лежат в области 440-450 нм.

Исследовано взаимодействие полученного материала с неполярными растворителями (толуол, бензол, *о*-ксилол и др.). После нанесения пробы (5-20 мкл) на поверхность сенсора ПДМС, набухая под действием растворителя, сдвигает верхний слой микросфер; растворитель заполняет межчастичное пространство фотонного кристалла, вытесняя воздух. Это приводит к увеличению периода упаковки фотонного кристалла, что видно через 3-5 мин по изменению цвета обработанной области из фиолетового в сине-зеленый. Максимумы спектров диффузного отражения сдвигаются в область 490-510 нм.

Изучено влияние формы и материала подложки (стекло, акрил, поликарбонат) и толщины слоя ПДМС на аналитический сигнал сенсора.

Предложенный сенсор позволяет обнаружить до $0{,}7 \cdot 10^{-5}$ моль толуола.

[1] Козлов А.А., Абдуллаев С.Д., Грицкова И.А. и др. // Тонкие химические технологии. 2015. Т.10. № 6. С.58-63.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЛЕГИРОВАНИЯ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ТЕРМОМИГРАЦИИ

Кузнецов В.В[1]., Рубцов Э.Р.[1], Середин Б.М.[2]
[1]Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
[2]Южно-Российский государственный технический университет
e-mail:vvkuznetsov@inbox.ru

Локальное легирование кристаллов кремния методом термомиграции жидких зон позволяет получать сложные структуры заданной конфигурации. Расширение возможностей указанного метода связано в первую очередь с увеличением компонентного состава растворителя, который влияет как на термодинамические, так и кинетические параметры термомиграции.

В работе исследовали влияние состава Al-Ga расплава на миграционнные процессы при перекристаллизации кремния. Поверхность ликвидуса в тройной системе Al-Ga-Si определяли в интервале температур 1000-1300^{0}C и широком диапазоне составов по растворимости кремниевой подложки .в Al-Ga расплаве. Анализ полученных данных проводили в рамках модели простых растворов [1], квазирегулярном приближении жидкой и идеальной твердой фазах с использованием выведенных нами уравнений фазового равновесия для тройной системы:

$$RT\ln x_i^l\gamma_i^l - RT\ln x_i^s\gamma_i^s = \Delta S_{F,i}^0\left(T - T_{F,i}^0\right)$$

$$RT\ln\gamma_{Al}^l = \alpha_{Si-Al}^l x_{Si}^l + \alpha_{Ga-Al}^l x_{Ga}^l + (\alpha_{Si-Al}^l + \alpha_{Ga-Al}^l - \alpha_{Si-Ga}^l)x_{Si}^l x_{Ga}^l$$

$$RT\ln\gamma_{Ga}^l = \alpha_{Si-Ga}^l x_{Si}^l + \alpha_{Ga-Al}^l x_{Al}^l + (\alpha_{Si-Ga}^l + \alpha_{Ga-Al}^l - \alpha_{Si-Al}^l)x_{Si}^l x_{Al}^l$$

$$RT\ln\gamma_{Si}^l = \alpha_{Si-Al}^l x_{Al}^l + \alpha_{Si-Ga}^l x_{Ga}^l + (\alpha_{Si-Al}^l + \alpha_{Si-Ga}^l - \alpha_{Ga-Al}^l)x_{Al}^l x_{Ga}^l$$

где R−универсальная газовая постоянная; $x_i^{l,s}$-концентрации компонента в жидкой или твердой фазах, ат.дол.; a_{ij}^l − параметр межатомного взаимодействия в жидкой фазе; $\Delta S^0{}_{F,i}, T^0{}_{F,j}$ − энтропия и температура плавления компонента, $\gamma_i^{l,s}$ - коэффициент активности компонента в жидкой или твердой фазах.

Параметры взаимодействия в жидкой фазе определяли с использованием данных по растворимости кремния в Al-Ga расплаве.

Получена высокая степень корреляции расчетных и экспериментальных данных, указывающая на адекватность применяемой модели. Результаты позволяют эффективно прогнозировать технологические параметры локального легирования кремния методом термомиграции.

[1] Кузнецов В.В., Москвин П.П., Сорокин В.С.//»Металлургия»,1991,176 с.

ТРАНСФОРМАЦИЯ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ В ПРОЦЕССЕ НАПРАВЛЕННОЙ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Ларин В.С.[1], Салем М.М.[2], Морченко А.Т.[2], Панина Л.В.[2], Коровушкин В.В.[2], Труханов В.А.[2], Чурюканова М.Н.[2], Лопатина Ю.А.[2]
[1]MFTI Ltd, [2]НИТУ “МИСиС”
e-mail: dratm@mail.ru, Elshshtawy@science.tanta.edu.eg

Композиты из ферромагнитных сплавов, приготовленные методом Улитовского-Тейлора в виде аморфных микропроводов в стеклянной оболочке, представляют собой магнитомягкий материал и проявляют ярко выраженные магнитоимпедансные свойства. В исходном состоянии такие провода являются магнитомягкими, но после отжига или термомагнитной обработки (ТМО) в определенных условиях становятся магнитотвердыми с магнитной бистабильностью их петель гистерезиса. Наиболее значительное увеличение коэрцитивной силы наблюдается в проводах, подвергнутых направленной кристаллизации с образованием кристаллитов микронного и субмикронного размера [1].

В качестве объекта исследования были выбраны микропровода различного диаметра номинального состава $Fe_{4,5}Co_{67,5}B_{14}Si_{11}Cr_3$. В исходном состоянии в них выявляются признаки наличия нанокристаллитов кобальта со средним размером ~1,7-1,8 нм, что можно считать практически квазиаморфным состоянием. Отжиг ферромагнитного сплава происходит внутри стеклянной оболочки, поэтому в проводе создаются условия для направленной кристаллизации вдоль его оси за счёт выделяемого при фазовом переходе тепла. Для стимулирования формирования наведенной текстуры использовалось аксиальное магнитное поле. Поскольку материал жилы находится в напряженно-деформированном состоянии, процесс преобразования аморфного состояния в кристаллическое протекает особенно интенсивно. На рис. 1 приведена картина рентгеновской дифракции провода после рекристаллизации.

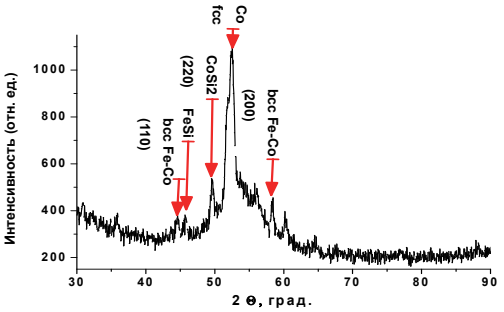


Рис.1. Спектр рентгеновской дифракции микропровода после направленной кристаллизации в магнитном поле

Трансформацию структурного состояния провода мы связываем прежде всего с формированием и ростом кристаллитов г.ц.к. Co (размер ОКР ~6 нм), что несколько расходится с данными [1]. Пиками слабой интенсивности представлены также другие фазы, возможные в данной системе, а фон соответствует остаточной аморфной матрице.

[1] Larin V.S., Panina L.V., et.al. // Phys. Status Solidi (A): Appl. & Materials, 2016, v.213, No 2, p.384-389.

КРИСТАЛЛЫ МЕТАЛЛ-КИСЛОРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С МОРФОЛОГИЕЙ НАНОЛИСТОВ. СИНТЕЗ МЕТОДОМ ИОННОГО НАСЛАИВАНИЯ

Лобинский А.А., Толстой В.П.
Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета
e-mail: v.tolstoy@spbu.ru

В последнее время, как известно [1], изучению нанокристаллов с морфологией графено-подобных нанолистов (nanosheets) уделяется повышенное внимание. Это связано, в первую очередь, с возможностью их практического использования, например, в составе электродов электрохимичеких сенсоров и источников тока, фотокатализаторов и т.д. Среди таких соединений важное место занимают металл-кислородные соединения, включая широкий круг слоистых двойных гидроксидов, гидроксидов или оксидов Mn, Ni, Ti и др.

В докладе делается краткий обзор методов получения таких нанокристаллов и рассматриваются особенности их синтеза методами “расслаивания” блочных монокристаллов со слоистой кристаллической структурой, гидротермальным, микроволновым и др. Особое внимание уделяется приоритетному методу ионного наслаивания (ИН) [2] как методу, который позволяет выполнить синтез в условиях “мягкой химии”. Впервые приводятся результаты синтеза слоев, состоящих из совокупности нанолистов толщиной от 3 до 12 нм и с площадью до 1 мкм^2 и среди них слоев γ-NiOOH с гексагональной структурой, $Co_2Al(OH)_{7-x}(NO_3)_x{\cdot}nH_2O$, $NaZn(Co^{2+},Co^{3+})(OH)_2(Cl)_x{\cdot}nH_2O$, $Zn(Co^{2+},Co^{3+})(OH)_2(SO_4)_x{\cdot}nH_2O$ и $Zn(Ni^{2+},Ni^{3+})(OH)_2(SO_4)_x{\cdot}nH_2O$ со структурой гидроталькита и Na_xMnO_2 со структурой бернессита. Отмечается эффект образования в процессе синтеза нанолистов не только планарно расположенных на поверхности подложки, то и частично ориентированных перпендикулярно ее поверхности.

На основе полученных экспериментальных результатов для каждого из отмеченных соединений построены модели химических реакций, протекающих на поверхности подложки в процессе ИН, и сделаны рекомендации по их практическому применению.

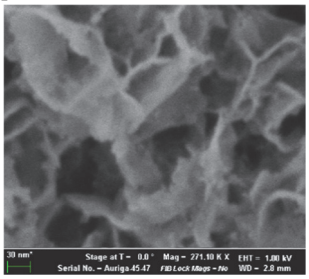


Рис.1. Электронная микрофотографии слоя Na_xMnO_2, синтезированного на поверхности кремния в результате 30 циклов ИН.

Работа поддержана грантом РФФИ № 15-03-09253.

[1] Geim A.K., Grigorova I.V. // Nature, 2013, vol. 499, p. 419–425

[2] Толстой В.П. // Успехи химии, 2006, № 2, с. 183-199.

ИНЕТИКА ПОВЕРХНОСТНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ КОНДЕНСАЦИИ И ИСПАРЕНИИ ПЛЁНОК, ПОЛУЧАЕМЫХ ИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ TE НА МЕТАЛЛИЗИРОВАННЫХ ПОДЛОЖКАХ.

Михайлов В.И., Поляк Л.Е., Клевачёв А.М., Шурухнов Н.Е.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: alexey_klevachev@mail.ru

Целью данной работы является изучение переходных процессов установления стационарной концентрации адсорбированных частиц на поверхностях металлизированных подложек. Данная работа является продолжением изучения начальных стадий роста плёнок CdTe, Te и условий зарождения островков при МЛЭ [1,2]. В данной работе исследуются процессы испарения и конденсации плёнок, полученных из молекулярного пучка Te2.

Эксперименты проводились на лабораторной установке молекулярно-лучевой эпитаксии, позволяющей исследовать кинетику процессов эпитаксии и строение наросших кристаллических плёнок *in situ* за счет встроенных в установку масс-спектрометра и дифрактометра быстрых электронов. Для исследований были применены специально подготовленные подложки с предварительно нанесённым покрытием никеля или меди.

В экспериментах получены пленки Te толщиной 100-200 нм. Исследовано изменение соотношения атомов и молекул теллура в десорбционном потоке от поверхности подложки в диапазоне температур 300-700^{0}C, отмечена разница времён жизни атомов на разных подложках.

Полученные *in situ* электронограммы образцов, на подложках обоих типов указывают на поликристалличность пленок Te.

В докладе приводятся данные о поверхности использованных подложек, полученные методами электронографии, зондовой микроскопии. Обсуждается влияние состояния поверхности на процессы зарождения и начальные стадии роста пленок Te.

[1] В. И. Михайлов, Л. Е. Поляк, В. М. Каневский, Масс-спектрометрическое исследование кинетики молекулярно-лучевой эпитаксии CdTe, Поверхность, 2007г., №11, с.1-7.

[2] В. И. Михайлов, Л. Е. Поляк, В. М. Каневский, А. С. Писарев, Масс-спектрометрическое исследование конденсации и испарения теллура на сапфире, Поверхность, 2014г., №4, с.5-8.

ЭЛЕКТРОННО-ДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТИСОНИТОВОЙ ФАЗЫ $Er_{0.7}Ca_{0.3}F_{2.7}$

Николайчик В.И.[1,2], Соболев Б.П.[2], Сорокин Н.И.[2], Авилов А.С.[2]
[1] *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН*
[2] *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*
e-mail: nikola@iptm.ru

Нестехиометрические фазы $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ (R = La – Lu, Y; M = Ca, Sr, Ba) со структурой типа тисонита (LaF_3) привлекают особое внимание из-за высоких значений ионной проводимости по ионам фтора. В связи с этим характер фазовых соотношений в системах RF_3-MF_2 в области составов богатых редкоземельными элементами и структура существующих в них фторидов представляют интерес. В системах RF_3-MF_2 с редкоземельными элементами с конца ряда формируется тисонитовая фаза состава $R_{0.7}M_{0.3}F_{2.7}$ с малой ионной проводимостью. В данной работе проведено электронно-дифракционное исследование кристаллов $Er_{0.7}Ca_{0.3}F_{2.7}$ и построена структурная модель этой фазы.

Исследование выявило, что фаза $Er_{0.7}Ca_{0.3}F_{2.7}$ имеет моноклинную структуру и является сверхструктурной производной тисонита, что обусловлено катионным упорядочением. Исходя из связи сверхструктурных отражений с основными отражениями тисонитовой решетки определены параметры сверхячейки и приблизительные позиции ионов. Анализ законов существования отражений выявил принадлежность ячейки фазы к трем возможным пространственным группам C2, Cm, C2/м, из которых только в рамках пространственной группы C2 позиции ионов в сверхячейке могут соответствовать приблизительным и в которой реализуется состояние с полным катионным упорядочением. Сопоставлением расчетных картин электронной дифракции с экспериментальными определены позиции ионов эрбия и кальция в сверхячейке $Er_{0.7}Ca_{0.3}F_{2.7}$, что в свою очередь позволило установить позиции окружающих их ионов фтора.

Предложенная модель с полным катионным упорядочением указывает на отсутствие вакансий химической природы в упорядоченной фазе $Er_{0.7}Ca_{0.3}F_{2.7}$, что объясняет ее очень малую ионную проводимость.

Работа поддержана РФФИ (проект №14-03-00178).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ РЕЖИМОВ CVD-ПРОЦЕССА НА ПАРАМЕТРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПРИМЕНЯЕМЫХ В ИОНИЗАЦИОННЫХ СЕНСОРАХ ГАЗОВ

Рудык Н.Н., Ильин О.И., Федотов А.А., Сучков Д.О.
Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения
Южный федеральный университет
e-mail: nnrudyk@sfedu.ru

Ионизационные газовые сенсоры на основе углеродных нанотрубок (УНТ) обладают таким преимуществами, как высокая селективность, малое время срабатывания и восстановления, низкие рабочие напряжения, высокая стабильность. Наиболее перспективным методом формирования УНТ непосредственно на подложке для последующего применения в газовых сенсорах, является метод химического осаждения из газовой фазы (CVD), особенностью которого является возможность выращивания УНТ на каталитических центрах в заданных местах подложки и управлением различными параметрами процесса [1].

В данной работе проводились исследования образцов с УНТ (рис. 1) методом рамановской спектроскопии, полученных при температурах 700, 750 и 800 °C. Было обнаружено, что для образца с УНТ, выращенными при температуре 750 °C графитовая мода (G-band) является наиболее выраженной, что говорит о формировании наиболее качественных УНТ в данном диапазоне температур. Поэтому для формирования чувствительного элемента ионизационного газового сенсора рост УНТ проводился при температуре 750 °C.

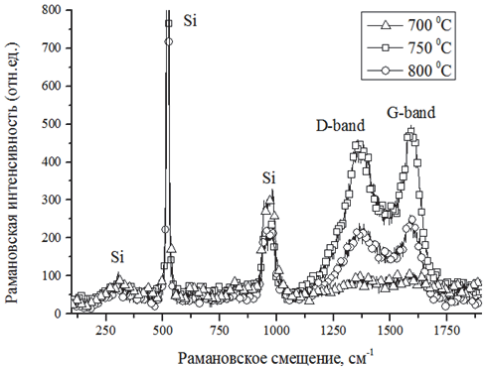


Рис.1. Рамановские спектры образов с УНТ

Изготовленный макет газового сенсора представляет два параллельных электрода, на одном из которых методом CVD формировался массив УНТ. Проведенные экспериментальные исследования показали чувствительность макета к аммиаку и аргону различных концентраций.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-29-14023 офи_м и № 16-37-00101 мол_а).

[1] Ageev O.A. [et al.] // Springer International Publishing Switzerland. Chapter In: Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications.- 2016.- p. 563-580.- ISBN: 978-3-319-26324-3.

ВЛИЯНИЕ ОСЕВОГО ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ НА УСЛОВИЯ РОСТА ВЕРТИКАЛЬНЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА КРИСТАЛЛОВ Ge, ЛЕГИРОВАННЫХ Ga

Сидоров В.С., Коробейникова Е.Н., Стрелов В.И., Кожемякин Г.Н.
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
E-mail: enkorob@mail.ru

Одним из недостатков при выращивании однородных монокристаллов полупроводников методом Бриджмена является слоистая неоднородность легирующих компонентов. Подавление конвективного перемешивания у границы раздела фаз за счет уменьшения градиента температуры в расплаве снижает слоистость. В данной работе проведены экспериментальные исследования и физическое моделирование влияния осевого градиента температуры на конвективные течения в расплаве для вертикального метода Бриджмена.

Рост кристаллов проводили вертикальным методом Бриджмена на установке, позволяющей изменять осевой градиент температуры с помощью трех резистивных нагревателей. Кристаллы германия, легированного галлием до 10^{19} см$^{-3}$ выращены на монокристаллическую затравку в направлении <111> из цилиндрического графитового тигля с внутренним диаметром 23 мм и высотой 90 мм при разрежении 10^{-4} Тор. Осевой градиент температуры и скорость охлаждения составляли 10 К/см и 0.1 К/мин, соответственно. Для проведения структурных исследований выращенные кристаллы разрезали параллельно оси роста, шлифовали, полировали и травили в травителе СР-4. Физическое моделирование конвективных процессов для условий роста данных кристаллов проводили методом «светового ножа» в прозрачной жидкости. Осевой градиент температуры изменяли от 0.3 до 7 К/см.

Полученные кристаллы имели монокристаллическую область. Концентрация галлия увеличивалась к концу слитка от $1.4\cdot10^{18}$ см$^{-3}$ до $5\cdot10^{18}$ см$^{-3}$. Физическим моделированием установлено, что скорость течений при данных градиентах температуры изменялась от 0.027 мм/с до 0.092 мм/с. Включение верхнего нагревателя позволяло уменьшить градиент температуры в расплаве, за счет чего снижалась скорость конвективных потоков в 1,5 раза.

СОБСТВЕННАЯ ФТОР-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ BaF_2 (ТИП ФЛЮОРИТА) И LaF_3 (ТИП ТИСОНИТА)

Сорокин Н.И., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Фториды MF_2 (M = Ca, Sr, Ba) со структурой флюорита и RF_3 (R = La, Ce, Sr, Nd) со структурой тисонита являются высокотемпературными суперионными проводниками по фтору. Их собственная электропроводность σ_{dc}, обусловленная термическими дефектами в анионной подрешетке, проявляется для “чистых” кристаллов при температурах > 400–500 °С. Измерения при этих температурах осложнены пирогидролизом и представляют сложную экспериментальную задачу. Цель работы – впервые сравнить собственные ионные проводимости σ_{dc} кристаллов BaF_2 и LaF_3, выращенных по одной ростовой методике. Эти соединения являются кристаллическими матрицами одних из лучших фтор-проводящих твердых электролитов $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ и $R_{1-y}M_yF_{3-y}$.

Кристаллы BaF_2 и LaF_3 получены из расплава в ГОИ (СПб) [1]. Объемная проводимость σ_{dc} кристаллов рассчитана из спектров импеданса (1–10^6 Гц, Solartron 1260) в защитной атмосфере N_2 при 323 – 1073 К. Погрешность σ_{dc} < 2 %. Блокирующий эффект от инертных (Ag) электродов в спектрах импеданса говорит об ионной проводимости.

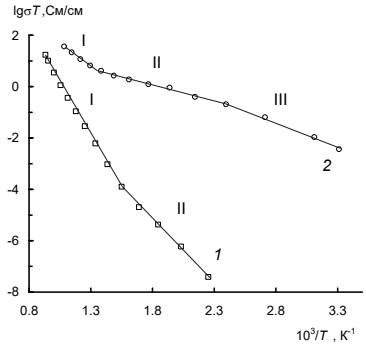


Рис. 1. Ионная проводимость кристаллов BaF_2 (*кривая 1*) *и* LaF_3 (*кривая 2*).

На рис. 1 области I относятся к собственной σ_{dc}, области II и III – к примесной σ_{dc}. Собственная проводимость LaF_3 (дефекты Шоттки) выше, чем флюоритовой решетки BaF_2 (дефекты Френкеля). При 500 °С для LaF_3 $\sigma_{dc} = 8.5\times10^{-3}$ См/см и различие в σ_{dc} между LaF_3 и BaF_2 составляет ~ 400 раз. Рис. 1 демонстрирует влияние на собственную σ_{dc} однокомпонентных фторидов типа структуры, вида дефектообразования, плотности упаковки, температурной зависимости $\sigma_{dc}(T)$ и показывает предпочтительность матрицы LaF_3 для разработки ФТЭЛ.

Работа выполнена по НИР ИКАН № 01291153836 «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Трофимова Л.М., Рейтеров В.М. и др. // Авт. свид. СССР №1037690, приоритет от 01.10.1980, опубл. 27.07.2000.

ОБЪЕМНЫЕ МИКРОДЕФЕКТЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $CaMoO_4$

Черных А.Г.[1], Козлова Н.С.[2], Козлова А.П.[2], Бузанов О.А.[3]
[1] ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] НИТУ «МИСиС»
[3] ОАО «Фомос-Материалс»
e-mail: chernykh.anastasya@yandex.ru

В процессе выращивания по методу Чохральского монокристаллы $CaMoO_4$ приобретают синюю окраску, что крайне нежелательно для их применения в качестве материала для криогенного сцинтилляционного детектора, предназначенного для регистрации безнейтринного двойного бета-распада изотопа ^{100}Mo [1]. Для решения этой проблемы кристаллы подвергали длительному окислительному отжигу при температуре 1250 °C и периодически проводили контроль оптических свойств, оценивали неоднородность и дефектность образцов при помощи поляризационного микроскопа Axio Imager M1m в проходящем и отраженном свете.

Для исследования были вырезаны образцы $CaMoO_4$ в форме куба объемом 10,9 мм^3, цилиндры с высотой 20 мм и радиусом основания 5 мм. Одна из пар граней каждого куба, а также основания цилиндров были перпендикулярны оптической оси.

При исследовании методом оптической микроскопии в объеме монокристаллов были обнаружены микродефекты неизвестной природы. Выявлено, что дефекты наибольшего размера (6,5 – 8 мкм) наблюдаются в образцах «as grown», с увеличением времени отжига размеры и концентрация их уменьшаются. Получена плотность распределения дефектов по глубине и в плоскости, перпендикулярной оптической оси. Анализ коноскопических картин, полученных при изучении монокристаллов $CaMoO_4$, позволил сделать вывод о неоднородности образцов. При исследовании в поляризованном отраженном свете на отдельных дефектах внутри кристаллов наблюдались интерференционные картины (рис. 1).

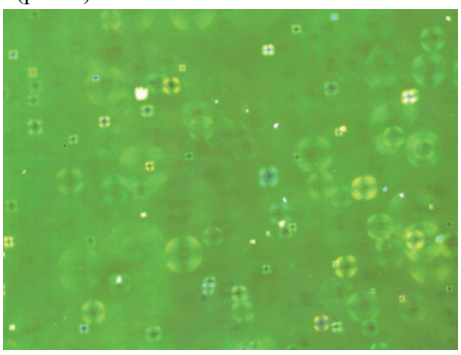


Рис.1. Интерференционная картина, наблюдаемая в поляризованном отраженном свете на глубине 1 мм от поверхности образца $CaMoO_4$.

[1] Козлова Н.С., Бузанов О.А. и др. Исследование монокристаллов $CaMoO_4$ с низким остаточным поглощением // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники, 2014, №3, с.168–173.

СТРУКТУРА И ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СВОЙСТВ TiNi

Чумляков Ю.И[1]., Кодесс Б.Н.[2]
[1] ФГУП «ВНИИМ»
[2] Сибирский физико-технический институт Национального исследовательского Томского государственного университета
e-mail: kodess@mail.ru

Образцы с эффектом памяти формы составов (Ti-50-51at.%Ni) были проанализированы методами прецизионной рентгеновской дифрактометрии. Монокристаллы выращивали в атмосфере гелия методом Бриджмена. На ориентированных срезах из этих монокристаллов определены особенности механических свойств с учетом различного влияния структурных переходов [1].

Данные для сфер, приготовленных из этих монокристаллов были собраны в полной сфере Эвальда (7-12 тысяч отражений) в Mo-Kα излучении. Сбор данных повторялся при повороте образца и проводился при напряжении 33 кВ (для исключения второй гармоники излучения). Для образцов, в которых результаты указывали возможность сосуществование фаз с различной симметрией элементарной ячейки, использовалась специальная методика работы с изображениями ССД-детектора для выделения массивов для каждой фазы. Определены структурные характеристики фаз, которые могут сосуществовать при комнатной температуре (кубическая, орторомбическая (искаженная гексагональная), моноклинная. Определение размеров элементарных ячеек проводилось по результатам измерений в высокоугловом диапазоне. Значение для кубической фазы a=0.301 нм хорошо согласуется с литературными данными. Также согласие получено для гексагональной несоизмеримой фазы, появление которой предшествует полному мартенситному превращению в моноклинную фазу. В тоже время значение угла в элементарной ячейке моноклинной фазы почти на градус ниже значений, представленных в ранних структурных работах [2].

[1] Чумляков, Ю. И., Киреева, И. В., Поклонов, В. В., Победенная, З. В., & Karaman, I. (2014). Письма в ЖТФ, *40*(17).

[2] Kudoh, Y., Tokonami, M., Miyazaki, S., & Otsuka, K. (1985). *Acta Metallurgica*, *33*(11), 2049-2056.

Микросимпозиум 7. Метаматериалы и фотонные кристаллы

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОДНОРОДНЫХ И ЭВАНЕСЦЕНТНЫХ МОД ПРИ РАССЕЯНИИ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ НА ОДНОМЕРНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Барабаненков М.Ю.[1,2], Итальянцев А.Г.[2]
[1]ФГБУН «Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов» РАН
[2] АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»
e-mail: barab@iptm.ru

Эффекты взаимной трансформации полей ближней и дальней волновых зон, возникающие при поверхностном или объемном рассеянии электромагнитных (ЭМ) волн, стали принципиально важны для понимания свойств т.н. ЭМ кристаллов, совершенствования методов преодоления дифракционного предела в микроскопии ближнего поля и литографии, повышения чувствительности фотодетекторов и эффективности светодиодов.

В данной работе на основе метода уравнения Риккати [1] анализируется эффект подавления зеркального отражения от 1D периодической поверхности (2D дифракционной решетки) с точки зрения взаимной энергетической трансформации однородных (распространяющихся) волн (дальних полей) и неоднородных (эванесцентных, экспоненциально затухающих по одному направлению) волн ближнего поля при рассеянии ЭМ волны на решетке. Упомянутый эффект является частным случаем т.н. “параллельных” аномалий Вуда [2], состоящих в резком уменьшении эффективности отражения, которое не связано с возбуждением плазмонов в материале решетки, а обусловлено многократным отражением между направляющими решетки взаимодействующих однородных и эванесцентных спектральных порядков. Показано, что исключение эванесцентных волн из энергетического взаимодействия приводит к отсутствию эффекта подавления зеркального отражения, а в случае фотонных кристаллов - существенно деформирует край фотонной запрещенной зоны.

[1] Барабаненков Ю.Н., Барабаненков М.Ю..// ЖЭТФ, 2003, т.123, вып.4, стр. 763-774.

[2] Hessel A., Oliver A.A. // Appl. Opt., 1965, v.4, p.1275.

ВЗАИМНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ВЛОЖЕННЫХ КОЛЬЦЕВЫХ ЦЕПОЧЕК МАЛЫХ ПЛАЗМОННЫХ ЧАСТИЦ

Барабаненков М.Ю.[1,3], Барабаненков Ю.Н.[2]
[1]ФГБУН «Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов» РАН
[2]ФГБУН «Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова» РАН
[3] АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»
e-mail: barab@iptm.ru

Ансамбли наночастиц проявляют оптические свойства, используемые в приложениях современной медицины, нанобиотехнологии, фотохимии, спектроскопии, оптоэлектроники [1]. Обычно рассматривается проблема существования собственных коллективных оптических мод в 3D или низкоразмерных конечных системах частиц, с исследованием добротности и спектров экстинкции собственных мод, или проблема возбуждения коллективных мод в системе частиц. Однако, не затрагивается физическое явление взаимодействия мод во внутренней части системы частиц с модами на ее внешней части.

В докладе сформулирован общий подход к решению проблемы о взаимодействии мод внутренней части, ограниченной 2D системы малых плазмонных сферических частиц с модами ее внешней части. Подход основан на общем методе квази-сепарабельного Т- оператора рассеяния [2] для решения задач многократного рассеяния электромагнитных волн на ансамблях диэлектрических частиц с учетом их проводимости. Аналитическое решение о взаимном влиянии токов во внутреннем и внешнем кольцевых кластерах иллюстрируется на простом примере правильного треугольника, в вершинах и во внутренней точке симметрии которого помещены частицы, и двух вложенных квадратных ячеек с восьмью частицами в вершинах. Предполагаются малые плазмонные сферические частицы с электродипольным взаимодействием и вектором поляризации электрического поля падающей волны, перпендикулярным плоскости кольцевой системы. Возбуждается только внешний или внутренний кластер.

[1] Kumbhakar P, Ray S.S., Stepanov A.L., J. Nanomaterials, 2014, v. 2014, p.1-2.

[2] Барабаненков Ю.Н., Барабаненков М.Ю. // Журнал радиоэлектроники, 2013. №4, стр.1.

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА ПОД СУБВОЛНОВОЙ АЛЮМИНИЕВОЙ РЕШЕТКОЙ

Блинов Л.М., Лазарев В.В., Юдин С.Г., Артемов В.В., Палто С.П., Горкунов М.В.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ИК РАН
e-mail: lev39blinov@gmail.com

Исследуется электрооптический эффект в наноразмерной структуре, состоящей из стеклянной подложки, с прозрачным слоем оксида индия с оловом (ITO) толщиной $d\approx90$ нм, прозрачной пленки органического сегнетоэлектрика (СЭ) P(VDF/TrFE) толщиной $d\approx25$ нм и слоя Al толщиной $d\approx70$ нм, контактирующего с воздухом сверху. Пленка СЭ ограничена двумя электродами, т.е. слоями ITO и Al. В слое Al вытравлена квадратная (30x30 мкм^2) одномерная решетка с шагом 0.33 мкм, а в качестве эталона вытравлен такой же квадрат, но без решетки. Спектры коэффициентов пропускания (КП) поляризованного света при подаче напряжения U=0-12 В измеряются для оценки влияния напряжения на изменение показателя преломления СЭ пленки (n=1.43). Свет лампы, установленной в микроскопе (x40) проходит через эталонный квадрат, фиксируя интенсивность прошедшего света (100%), а затем и сквозь решетку, тем самым определяя КП с помощью спектрометра. На вставке к рисунку виден плазмонный провал в TM спектре, характерный для решеток с субмикронным периодом [1].

При подаче серий Sin-образных импульсов с длительностью 20 мс синхронизация спектрометра позволяла фиксировать только положительную часть импульса.

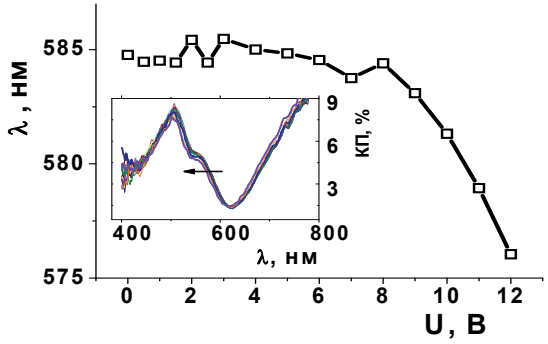


Рис.1 Вставка: TM спектры с провалом КП $\lambda\approx620$ нм (напряжение от 0 до 12 В). Основной график: сдвиг того же провала от напряжения U=0-12 В в сторону коротких волн.

На рисунке показана картина сдвига провала влево (стрелка на вставке) с изменением длины волны от 584 до 575 нм при U= 0-12 В (положение КП=3.5% фиксировано той же стрелкой). Максимальный сдвиг равен 9 нм. Отсюда можно вычислить величину отрицательной добавки ($\Delta n\approx-0.03$) к показателю преломления СЭ. Исследование выполнено за счет гранта РНФ (№14-12-00553).

[1] С.П. Палто и др. //Письма ЖЭТФ, 2016, том.103, №1, с. 27-31

ОПТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УПАКОВКИ НАНОЧАСТИЦ ПОСЛЕ ВЫСЫХАНИЯ В МИКРОКАПЛЯХ

Богданова М.В.[1], Лебедев-Степанов П.В.[2]
[1] *ООО «Кинтех Лаб»*
[2] *ФНИЦ «КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ФОТОНИКА» РАН*
e-mail: bogdanova@kintechlab.com

Упорядоченные структуры наночастиц образуются при испарении микрокапли раствора на плоской поверхности подложки [1-3]. В процессе самоорганизации частиц примерно равного размера и сферической формы может образовываться многослойная периодическая структура с гранецентрированной кубической решеткой. Если частицы имеют достаточно правильную форму и равный размер, эта система будет работать как фотонный кристалл для электромагнитного излучения с длиной волны порядка постоянной решетки.

Форма микрокластера из самоорганизованных наночастиц и степень их упорядоченности может управляться параметрами растворителя и подложки, значением поверхностного заряда частиц, температурой испарения, динамикой контактной линии и т.д. [4]. В реальных каплях могут образоваться как упорядоченыые домены, так и полностью разупорядоченные структуры.

В работе проанализированы оптические спектры для структур из наночастиц, полученных при высыхании нескольких капель. На спектре отражения для наиболее упорядоченной капли виден характерный пик. Положение этого пика определяется средним периодом решетки в слое. Показано, что высота пика зависит от упорядоченности структуры. Причиной появляющегося пика в спектре отражения является резонансное релеевское рассеяние в упорядоченном слое.

Описанный оптический метод диагностики может быть использован для анализа степени упорядоченности частиц после высыхания в микрокапле.

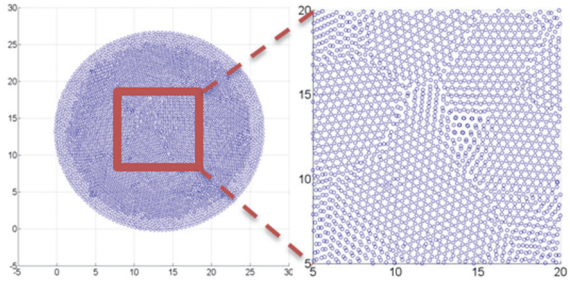


Рис.1. Положение наночастиц в микрокластере с хорошей степенью упорядочения (все размеры в микронах)

[1] G. Nicolis, I. Prigogine, Self-Organization in Nonequilibrium Systems: From Dissipative Structures to Order through Fluctuations,Wiley, New York, 1977.

[2] J. Park, J. Moon, H. Shin, D. Wang, M. Park // J. Colloid Interface Sci., 2006, Vol. 298, pp. 713–719.

[3] L.V. Andreeva, A.V. Koshkin, P.V. Lebedev-Stepanov, A.N. Petrov, and M.V. Alfimov // Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Aspects, Vol. 300, 300–306, 2007.

[4] P.V. Lebedev-Stepanov, S.P. Gromov, S.P. Molchanov, N.A. Chernyshov, I.S. Batalov, S.K. Sazonov, N.A. Lobova, N.N. Shevchenko, A.Yu. Men'shikova, M.V. Alfimov, // Nanotechnologies in Russia, 2011, Vol. 6, Issue 9-10, pp. 569-578.

НОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ, ПОГЛОЩЕНИЯ И ЭМИССИИ ОДНОМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ МЕТАМАТЕРИАЛОВ

Мкртчян А.Р.[1,2], Геворгян А.А.[1,3]
[1]*Институт Прикладных Проблем Физики НАН РА*
[2]*Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет*
[3]*Ереванский Государственный Университет*
e-mail: agevorgyan@.ysu.am

Исследованы особенности поглощения и эмиссии одномерного фотонного кристалла (ФК) на основе метаматериала. Были найдены условия аномально сильного поглощения вблизи коротковолновой границы ФЗЗ, и условия для аномально слабого поглощения вблизи длинной волны границы ФЗЗ, и наоборот. Мы представили полную картину распределения сумарного поля в фотонно-кристаллическом слое для длины волн внутри ФЗЗ и вне и при двух собственных поляризациях. Исследовалась возможность связи между особенностями поглощения света и плотностью световой энергии, накопленной в среде.

Затем мы исследовали характеристики дифракции света в слое метаматериала при наличии двух встречно распространяющихся ультразвуковых волн. Картина дифракции в этом случае значительно богаче, чем в случае наличия одной ультразвуковой волны. Есть новые полосы дифракционного отражения в каждом порядке дифракции. Ширина полос отражения Брэгга, их количество, их расположение и частотное расстояние определяются параметрами среды и ультразвуковых волн, и все они могут быть управляемыми. Таким образом, эти системы могут быть использованы в качестве управляемых поляризационных фильтров и зеркал, конвертеров поляризационных мод, модальных дискриминаторов, мультиплексоры для циркулярно поляризованных волн, а также они могут быть использованы в качестве источников циркулярно (эллиптически) поляризованного света, управляемых оптических диодов, и они могут быть применены в лазерах с перестраиваемой длиной волны излучения. Мы рассматриваем также возможности получения излучения в ТГц области.

СВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Долганов П.В.
Институт физики твёрдого тела РАН
e-mail: pauldol@issp.ac.ru

Жидкокристаллические фотонные кристаллы образованы ориентационно упорядоченными молекулами. Возрастающий интерес к изучению жидкокристаллических фотонных кристаллов обусловлен, в частности, их уникальными физическими свойствами и потенциалом для практических приложений. Плотность фотонных состояний определяет основные характеристики оптических и спектральных свойств фотонных кристаллов. Центральное место в докладе будет уделено использованию различных экспериментальных методов и расчётам плотности фотонных состояний. Будут представлены результаты экспериментов и расчётов жидкокристаллических фотонных кристаллов. Это относится к спектральным, поляризационным характеристикам, возможности трансформировать спектральное положение и структуру фотонной запрещённой зоны путём внешних воздействий. В работе представлены результаты измерений пропускания, отражения, вращения плоскости поляризации света, люминесценции [1-3]. Развит метод определения плотности фотонных состояний хиральных фотонных кристаллов с помощью измерения вращения плоскости поляризации света. Изучена связь ориентационного упорядочения жидкого кристалла и оптических характеристик структуры. Проведен анализ полученных результатов на основе современных теоретических представлений. Показано, что экспериментальные результаты находятся в согласии с теорией.

Исследование выполнено при частичной поддержке РФФИ, грант 16-29-11702.

[1] Dolganov P.V., Ksyonz G.S. et al. // Phys. Rev. E, 2013, v. 87, p. 032506.

[2] Dolganov P.V. // Phys. Rev. E, 2015, v. 91, p. 042509.

[3] Долганов П.В., Гордеев С.О. и др. // ЖЭТФ, 2014, том 145, № 6, с 1010-1014.

СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА МАССИВОВ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА И ГЕНЕРАЦИИ ТРЕТЬЕЙ ОПТИЧЕСКОЙ ГАРМОНИКИ

Заботнов С.В.[1,2], Колчин А.В.[1], Ефимова А.И.[1], Георгобиани В.А.[1], Преснов Д.Е.[1], Елисеев А.А.[1], Головань Л.А.[1], Кашкаров П.К.[2,1]

[1] Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

[2] НИЦ «Курчатовский институт»

e-mail: zabotnov@physics.msu.ru

Одним из важных достижений кремниевых нанотехнологий в настоящее время является успешное использование кремниевых нанонитей (КНН) в приложениях [1]. Недавно было показано [2], что структурные параметры массивов КНН определяют эффективность рассеяния света и нелинейно-оптических процессов в последних, что открывает дополнительные возможности в области неразрушающей диагностики таких объектов.

В настоящей работе проведены измерения и анализ ориентационных зависимостей сигналов комбинационного рассеяния света (КРС) и третьей оптической гармоники (ТГ) массивов КНН толщиной от 0.2 до 16 мкм [2] и пластин монокристаллического кремния (КК) с ориентацией (100). *Структурная неоднородность массивов КНН, приводит к существенному увеличению актов светорассеяния и длины взаимодействия фотонов со средой, росту сигналов КРС и ТГ до 12 и 4 раз соответственно по сравнению с откликом от* КК. *Одновременно с ростом сигнала в обоих случаях ориентационные зависимости становятся все более и более изотропными (см., например, рис. 1) и отличающимися от соответствующих зависимостей для* КК *с точечной группой симметрии m3m,* что позволяет констатировать изменение точечной группы симметрии массивов КНН при рассмотрении их как эффективной среды.

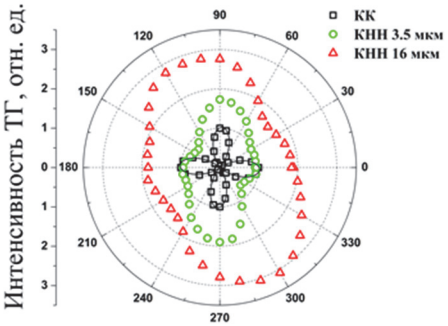


Рис.1. Ориентационные зависимости сигнала ТГ в КК и массивах КНН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-29-01185*).*

[1] Yang P., Yan R., and Fardy M. // Nano Lett., 2010, vol. 10, pp. 1529 – 1536.

[2] Zabotnov S.V., Kholodov M.M., et al. // Las. Phys. Lett., 2016, vol. 13, pp. 035902-1 – 035902-5.

ЛАЗЕРНАЯ НАНОКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ МЕТАЛЛОВ

Завестовская И.Н.

НИЯУ МИФИ

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

e-mail: INZavestovskaya@mephi.ru

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследований процессов нанокристаллизации поверхности металлов при прямом воздействии на них лазерных импульсов короткой и ультракороткой длительности. Акцент сделан на изучении технологий прямого лазерного воздействия, основанных на процессах плавления (с абляцией или без абляции) материала с последующей сверхбыстрой кристаллизацией расплавленной поверхности и являющихся перспективными для получения на поверхности структур нанометровых размеров.

На основе исследования кинетики сверхбыстрой кристаллизации расплава при лазерном воздействии на металлы определены доля закристаллизовавшейся фазы и размер получаемых кристаллитов в зависимости от термодинамических характеристик материала и параметров лазерного режима. Определен критерий аморфизации.

Теоретически исследован лазерный отжиг пористых дефектов металлических покрытий при облучении импульсами излучения наносекундной длительности. Развита самосогласованная модель схлопывания пор в металлических покрытиях при воздействии на поверхность импульсов лазерного излучения. Модель учитывает «локальное» движение жидкости вблизи произвольно выбранной поры, приводящее к затеканию жидкости внутрь поры и вызывающее изменение её размеров, и «макроскопическое» движение жидкости от поверхности к фронту плавления. Получено аналитическое выражение для ширины области, в которой происходит процесс схлопывания и определена критическая скорость движения расплава, соответствующая данному процессу. Определено пространственное распределение остаточной пористости материала в цикле плавление – затвердевание материала и её зависимость от параметров лазерного импульса [1].

[1] I.N. Zavestovskaya // “Fundamentals of Laser-assisted Micro- and Nanotechnolodies” Ed. By V. Veiko, V. Konov, Springer-Verlag Berlin, 2014, 195:51-75.

СИНТЕЗ МОНОДИСПЕРСНЫХ НАНО- И МИКРОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ И ФОРМИРОВАНИЕ ФОТОННОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Масалов В.М., Сухинина Н.С., Жохов А.А., Емельченко Г.А.
Институт физики твёрдого тела РАН
e-mail: masalov@issp.ac.ru

Для формирования фотоннокристаллических 2D и 3D структур широко используют сферические нано- и микрочастицы из диоксида кремния. В докладе изложены результаты исследований по синтезу частиц диоксида кремния и формированию прямых и инвертированных плёночных и объёмных опалоподобных структур.

Для получения частиц с узким распределением по диаметру (< 5%) были развиты методики гомогенного и гетерогенного гидролиза тетраэтоксисилана [1]. Были исследованы зависимости размеров, морфологии и однородности получаемых частиц от температурных, концентрационных и гидродинамических условий их синтеза. Предложены модели внутренней структуры и механизма формирования частиц в ходе их многоступенчатого выращивания [2].

Рис.1. Микрочастица диаметром 30 мкм, сложенная частицами SiO_2 диаметром 430 нм.

Фотоннокристаллические структуры из синтезированных частиц диоксида кремния формировали как в виде плёнок толщиной от единиц до нескольких десятков слоёв плотноупакованных частиц, так и в виде объёмных опаловых матриц. В докладе представлены результаты получения и исследования оптических и структурных свойств, инвертированных опалоподобных структур.

Были получены сферические структуры диаметром от 5 до 50 микрон путём плотнейшей упаковки частиц диоксида кремния диаметром 160, 200 и 430 нм и исследована их морфология [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №16-29-11702)

[1] В.М. Масалов, Н.С. Сухинина, Г.А. Емельченко. // ФТТ, 2011, т. 53, № 6, с 1072–1076.

[2]. V. M. Masalov, N. S. Sukhinina, E. A. Kudrenko and G. A. Emelchenko // Nanotechnology, 2011, v.22, p. 275718

[3] A.A. Zhokhov, V.M. Masalov, N.S. Sukhinina, D.V. Matveev, P.V. Dolganov, V.K. Dolganov, G.A. Emelchenko. Optical Materials, 2015, v. 49, с 208–212.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПОЛИДИСПЕРСНОСТИ ЧАСТИЦ НА СТРУКТУРУ КОЛЛОИДНОГО КРИСТАЛЛА

Маслов М.К.[1], Залужный И.А.[2,3], Лазарев С.В.[3,4], Вартаньянц И.А.[2,3]
[1] *МФТИ (ГУ)*
[2] *НИЯУ «МИФИ»*
[3] *Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY*
[4] *НИ ТПУ*
e-mail: mkmaslov@gmail.com

Коллоидный кристалл – это упорядоченная система частиц субмикронного размера. Коллоидные кристаллы являются перспективными материалами для создания фотонных кристаллов, способных манипулировать световыми сигналами [1-2]. Физические свойства коллоидных кристаллов во многом определяются их структурой. В работе исследовалось влияние полидисперсности коллоидных частиц на структуру кристалла методом ренгеновской дифракции.

Структура коллоидного кристалла моделлировалась при помощи численных алгоритмов, на основе метода Монте-Карло (Рис. 1а) [3]. Были исследованы двумерные картины дифракции от коллоидных кристаллов и проанализированы ширины Брэгговских пиков в радиальном и азимутальном направлениях (Рис. 1б). Получена зависимость ширины брэгговских пиков от дисперсии радиуса частиц. Анализ уширения дифракционных максимумов проводился по методике Вильямсона-Холла [4].

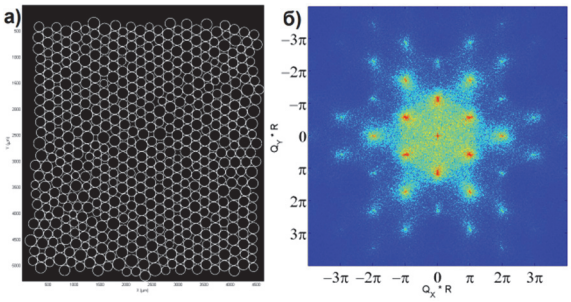


Рис.1. (а) Смоделированная кристаллическая решётка коллоидного кристалла. (б) Двумерная картина рентгеновской дифракции.

[1] A. Singer et al. // Science Advances, **2**(6), (2016)

[2] P. Vukusic and J. Sambles // Nature, **424,** 852-855, (2003)

[3] M. Allard and E. Sargent // Applied Physics Letters, **85,** 5887 (2004)

[4] M. Moram and M. Vickers // Reports on Progress in Physics, **72,** 036502 (2009)

IPS ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ ХИРАЛЬНЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С РАЗЛИЧНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Симдянкин И.В., Уманский Б.А.
ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН
e-mail: SimdyankinIvan@mail.ru

Ранее сообщалось об очень быстром электрооптическом эффекте в хиральных нематических жидких кристаллах (ХНЖК) при подаче электрического поля перпендикулярно спирали ХНЖК [1-3]. В этой геометрии, когда тонкий слой ХНЖК имеет планарную ориентацию (ось спирали перпендикулярна поверхности подложек), электрическое поле, направленное вдоль плоскости слоя (IPS), приводит к деформации спирали, что вызывает сильный электрооптический эффект. При соответствующей ориентации поляризатора и анализатора прошедший свет в некотором спектральном диапазоне может быть полностью скомпенсирован, что делает этот эффект многообещающим для электрооптического применения [2].

Электрооптический эффект в хиральных нематиках в этой геометрии был так же исследован в [3], где предполагалось, что этот эффект имеет флексоэлектрическую природу.

Для того чтобы прояснить вклад от флексоэлектрического взаимодействия в нашем случае, мы исследовали этот электрооптический эффект для ХНЖК с разными диэлектрическими анизотропиями, варьируемыми в диапазоне (от 0 до 7). Мы проанализировали влияние диэлектрической анизотропии на электрооптический отклик при импульсных электрических полях (интенсивность поля вплоть до 11 В/мкм) путем сравнения ХНЖК с различными диэлектрическими анизотропиями, но со схожими другими параметрами, такими как шаг спирали и толщина слоя ЖК. Найдено, что величина оптического отклика уменьшается до очень малых значений с уменьшением диэлектрической анизотропии, что указывает на малый вклад в данный эффект флексоэлектрического взаимодействия. Экспериментальные результаты так же сравнивались с численным моделированием с учетом вклада флексоэлектричества.

[1] Пасто С.П. и др. // ЖЭТФ, 2010, том 138, № 3, с 544-556.

[2] Барник М.И. и др. // Кристаллография, 2013, том 58, № 1, с 100-106.

[3] F.Castles et al. Phys. Rev E 80, 031709 (2009).

ОПТИЧЕСКИЕ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА МИКРОТРУБОК LaF_3, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ "СВОРАЧИВАНИИ" СЛОЕВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА РАСТВОР СОЛИ ЛАНТАНА-ГАЗООБРАЗНЫЙ HF

Толстой В.П., Гулина Л.Б.
Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета
e-mail: v.tolstoy@spbu.ru

Фотонные кристаллы с анизотропными свойствами, как известно, могут быть образованы упорядоченной совокупностью 1D нано- или микроразмерных материалов, в том числе нано- или микротрубок.

В настоящем докладе впервые анализируются оптические и люминесцентные свойства микротрубок LaF_3 и $La_{1-x}Eu_xF_3$, которые были получены по оригинальной методике [1, 2] в результате высушивания на воздухе слоев соответствующих составов, синтезированных в результате реакции газообразного HF с поверхностью водного раствора соли лантана. В этих работах впервые было показано, что в результате такого взаимодействия на границе раздела образуется слой толщиной до 800 нм, состоящий из массивов ориентированных нанолистов LaF_3 с кристаллической структурой тисонита и толщиной от 5 до 20 нм, определяемой условиями синтеза, который в процессе высушивания на воздухе "сворачивается" в микротрубки диаметром 20 - 80 мкм и длиной от 100 мкм и до 5 мм. Исследование микротрубок выполнено методами СЭМ, РСМА, ДТА, оптической микроскопии, рентгеновской дифракции, а также оптической спектроскопии пропускания и диффузного отражения, комбинационного рассеяния и люминесценции. Были изучены термические превращения при прогреве на воздухе и в инертной атмосфере и найдены такие условия синтеза и обработки, в результате которых образуются микротрубки $La_{0,95}Eu_{0,05}F_3$, проявляющие люминесцентные свойства (рис. 1).

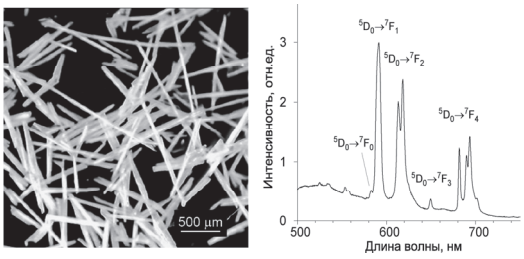


Рис.1. Микрофотография и спектр люминесценции микротрубок $La_{0,95}Eu_{0,05}F_3$.

В результате выполнения данной работы на основе полученных экспериментальных результатов построены модели анализируемых химических процессов и высказаны рекомендации по возможному практическому применению синтезированных микротрубок в составе фотонных кристаллов, оптических волноводов и др.

Работа поддержана грантом РНФ № 16-13-10223.

[1] Толстой В.П., Гулина Л.Б. // ЖОХ, 2014, том 84, № 8, с. 1243-1246.

[2] Gulina L.B., Tolstoy V.P., Kasatkin I.A., Petrov Y.V. // J. Fluorine Chem., 2015, vol. 180. p. 117-121.

HIGH ENERGY COHERENT X-RAY MICROSCOPY FOR PHOTONIC CRYSTALS

Snigireva Irina
European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France
e-mail: irina@esrf.fr

We present a coherent high energy X-ray microscopy brunch of the multimodal instrument which is under the development at the ID06 ESRF beamline. The microscope is developed microscope to study the wide range of natural and artificial mesoscopic materials that are structured on scales of the order of a few to a few hundred nanometres. By employing compound refractive lenses, it is possible to combine diffraction and direct space imaging [1-4]. The diffraction pattern of the specimen formed in the back focal plane of the condenser and two-dimensional image of the object generated by objective lens in its image plane [5]. The diffraction mode is used to investigate the structure over the macroscopic distances and to orient the crystals parallel to the low index direction to perform high-resolution imaging on the local scale. The image formation relies on phase contrast due to the interference of several diffracted beams. A coherent illumination is needed in imaging mode to ensure a reasonable contrast. The coherence in terms of the angular source size determines the lens angular resolution (< 1□rad) to get high resolution diffraction patterns.

Functioning at 10 – 30 keV, it consists of the condenser, the objective lens and two X-ray CCD cameras – large area detector for diffraction and high resolution CCD for imaging. Condenser and objective assemblies are comprised of Be parabolic refractive lenses. Switching from the diffraction mode to the imaging is achieved by placing the objective lens into the beam, and the chosen detector. The tunable objective lens offers full-field imaging with variable resolution and field of view. At present, at the maximum magnification a resolution of 100 nm is achieved, but in the near future we can expect resolution about 30 nm.

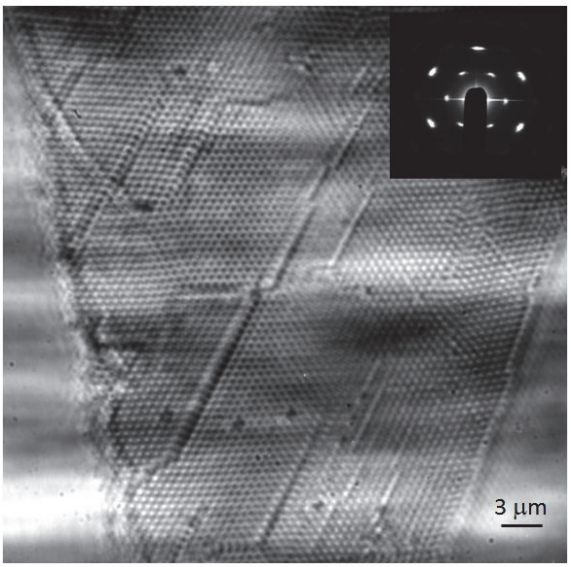


Fig.1. X-ray image together with corresponding diffraction pattern of Co inverted photonic crystal; orientation is <001> zone.

The microscope was applied for study of natural and synthetic opals, metal inverted photonic crystals and colloidal suspensions [5-7]. The combination of the direct-space imaging and high resolution diffraction provide a wealth of information on their local structure and the long range periodic order. Short acquisition times with modern area detectors allow to extend the microscope to time-resolved studies of the crystallization dynamics, response of the mesoscopic structures to external stimuli such as mechanical strain, temperature jump or temperature gradient as well as external fields.

[1] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler, Nature, 1996, **384**, 49.

[2] V. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, Opt. Comm., 2003, 216, 247.

[3] M. Drakopoulos, A. Snigirev, I. Snigireva, J. Schilling, Appl. Phys. Lett., 2005, **86**, 014102.

[4] P. Ershov, S. Kuznetsov, I. Snigireva, V. Yunkin, A. Goikhman, A. Snigirev, Appl. Cryst. , 2013, **46**, 1475.

[5] A. Bosak, I. Snigireva, K. Napolskii, A. Snigirev, Adv. Mater., 2010, **22**, 3256.

[6] V. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, J. Synchrotron Rad., 2014, **21**, 729.

[7] D. V. Byelov, J.-M. Meijer, I. Snigireva, et al, RSC Advances, 2013, **3**, 15670.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ ФЛЮОРИТОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ca_{1-x}Sr_xF_2$ ($0 \le x \le 1$) И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИХ СОСТАВА ДЕНСИТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Ивановская Н.А., Каримов Д.Н., Сульянова Е.А., Сорокин Н.И., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: knopa001@mail.ru

Твердые растворы $Ca_{1-x}Sr_xF_2$ ($0 \le x \le 1$) - функциональные материалы фотоники и оптическая среда для изучения механизмов взаимодействия активаторных катионов (в том числе РЗЭ) с флюоритовой решеткой. Поскольку подавляющий интервал составов флюоритовой фазы плавится инконгруэнтно, для проведения физических исследований требуется контролировать состав (x). Показана возможность использования для этой цели денситометрического метода, не разрушающего монокристаллические образцы.

Из расплава методом Бриджмена получены монокристаллические були $Ca_{1-x}Sr_xF_2$ диаметром до 15 мм и длиной до 50 мм без трещин и включений. Методика выращивания кристаллов дана в [1]. Флюоритовая структура подтверждена порошковой рентгеновской дифрактометрией (прибор X'PERT PRO, излучение CuK_α). Состав (x) определяли по величине параметра элементарной ячейки (эталон LaB_6) [2].

Измерения плотности ρ выполнены гидростатическим методом. Точность определения ± 10^{-2} г/см^3. Зависимости $\rho(x)$ от состава образцов в виде брусков (1) и произвольной формы (2) приведены на рисунке и совпадают. Видно, что наблюдается слабоквадратичное изменения $\rho(x)$ от состава: $\rho(x) = \rho_0 - 0.168x^2 + 1{,}236x$, где $\rho_0 = 3.181$ г/см^3 для CaF_2.

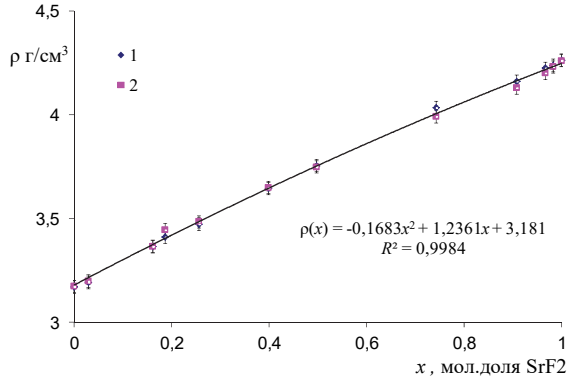


Рис. 1. Зависимость плотности от состава: образцы в виде брусков (1) образцы произвольной формы (2).

Показано, что измерения плотности можно использовать как неразрушающий экспресс-метод определения состава кристаллов $Ca_{1-x}Sr_xF_2$ с точностью ± 1 мол. % SrF_2.

Работа выполнена по НИР ИКАН № 01291153836 «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Каримов Д.Н., Комарькова О.Н. и др. // Кристаллография, 2010, том 55, № 3, с. 556–563.

[2] Попов П.А., Моисеев Н.В. и др. // Кристаллография, 2015, том 60, № 1, с. 116–122.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЕБАЯ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ, МЕТАЛЛОВ И ИХ СПЛАВОВ ПО ПЛАЗМОННОЙ ЧАСТОТЕ РЕШЕТКИ

Лебедев-Степанов П.В.
Центр фотохимии РАН (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН)
НИЯУ МИФИ
e-mail: petrls@mail.ru

Создание методов расчета температуры Дебая - важнейшей характеристики элементарных возбуждений кристаллической решетки (фононов), которая дает информацию о структуре и свойствах вещества и зависит от его размеров - актуально фундаментальной точки зрения (исследование структуры свойств твердого тела) и имеет важную практическую составляющую. Создавая макроскопический материал из наноструктур, с учетом как свойств отдельных наночастиц, так и их ансамблей, можно целенаправленно переносить свойства наночастиц в макрообласть. Предлагается новый теоретический подход к расчету фононных спектров в металлах, их сплавах и ионных кристаллах. Показано, что частота обрезания коллективных когерентных колебаний ионов лимитируется плазменной частотой ионов кристаллической решетки. [1]. Метод позволяет определить также скорость звука и некоторые другие свойства ионных кристаллов, металлов и металлических сплавов по плазменной частоте ионов кристаллической решетки.

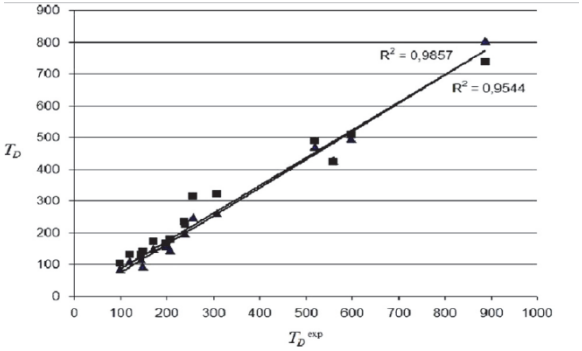


Рис.1. Рассчитанные по предложенному нами методу (вертикальная ось) и экспериментальные (найденных из констант упругости или др.методами) значения температуры Дебая (горизонтальная ось).

Теоретически рассчитана температура Дебая для нескольких десятков кристаллов, таких как NaCl, KCl, RbI, AgBr, Cu, Au, а именно, 308 K, 238 K, 98 K, 149 K и 296 K соответственно, в то время как эксперимент дает 321 K, 235 K, 103 K, 140 K и 285 K соответственно (рис.1). Надежность расчетных значений для одновалентных и двухвалентных чистых металлов характеризуется коэффициентом корреляции 0.985.

Метод позволяет вычислять температуру Дебая в экстремальных условиях, когда непосредственное измерение свойств затруднено, – например, для сильно сжатых веществ. Как показал наш расчет, при давлении 2.60 Мбар металлический водород имеет температуру Дебая 4000 K и скорость звука 20 км с$^{-1}$.

[1] Lebedev-Stepanov P.V // J. of Physics and Chemistry of Solids, 2014, Vol. 75, №7, pp. 903–910.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ФТОР-ИОННУЮ ПРОВОДИМОСТЬ И ДЕФЕКТНУЮ СТРУКТУРУ КРИСТАЛЛОВ SrF_2

Сорокин Н.И., Каримов Д.Н., Гребенев В.В., Сульянова Е.А., Болотина Н.Б., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Фтор-ионная проводимость σ_{dc} кристаллов MF_2 (тип CaF_2) зависит от условий получения [1]. При закалке кристалл сохраняет (частично) анионное разупорядочение. При медленном охлаждении (отжиге) уменьшается дефектность.

Впервые изучены зависимости $\sigma_{dc}(T)$ кристаллов SrF_2, полученных закалкой расплава и «as grown» с медленным охлаждением внутри ростовой установки.

Реактив SrF_2 (99.995 масс. %, кислород < 0.05 масс. %) фторировали в расплаве 3 ч в смеси гелия и CF_4. При закалке расплав охлаждали отключением электропитания. Средняя скорость закалки ~25 °С/мин. Кристаллы «as grown» получены методом Бриджмена и охлаждались со скоростью ~3 °С/мин.

Статическую объемную электропроводность σ_{dc} рассчитывали из измерений спектров импеданса ($1–3\times10^7$ Гц, 420–770 К). Термический режим получения SrF_2 влияет на $\sigma_{dc}(T)$ (*рис. 1*). Проводимость SrF_2 «as grown» (*1*) в 20–60 раз ниже, чем у закаленных (*2*).

Термическая история образцов SrF_2 в ранее опубликованных σ_{dc}-данных не учитывалась. Это - одна из причин сильных разногласий литературных данных.

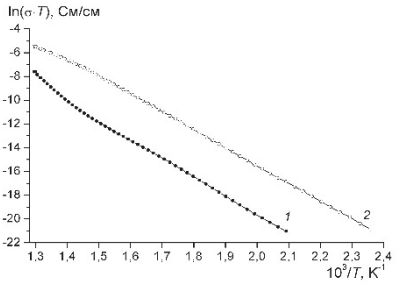


Рис. 1. Фтор-ионная σ_{dc} SrF_2 *«as grown»* (*1*) *и закаленного* (*2*).

Проводимость SrF_2 вызвана дефектами Френкеля: вакансиями V_F^+ и междоузельными F_{int}^-. В структуре фаз $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ (M = Ca, Sr, Ba; R–редкоземельные элементы) локализованы F_{int}, начиная с ~ 6 мол. % RF_3 [2]. Закаленный и «as grown» кристаллы SrF_2 изучены методом рентгеноструктурного анализа. Оба кристалла содержат вакансии в анионном мотиве, но точность методики не позволила определить их количественно.

Работа выполнена по НИР № 01291153836 ИК РАН «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Ito Y., Koto K. et al. // Solid State Ionics, 1985, vol. 15, p. 253-258.

[2] Hofmann M., Hull S. et al. // J. Phys.: Cond. Matter. 1997, vol. 9, p. 845-857.

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ЗАРЯДА В СУПЕРИОННОМ ПРОВОДНИКЕ α-$LiIO_3$

Сорокин Н.И.[1], Шалдин Ю.В.[1,2], Matyjasik S.[2]
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
International Laboratory of Magnetics Fields and Low Temperatures
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Особенностью атомного строения кристаллов α-$LiIO_3$ являются каналы вдоль оси *c* (полярный *z*-срез), в которых располагаются подвижные ионы Li^+. Это приводит к их высокой одномерной (*1D*) Li^+-проводимости. Кристалл α-$LiIO_3$ выбран в качестве модельного при исследовании термостимулированной деполяризации *1D*-суперионников.

Кристаллы α-$LiIO_3$ получены методом испарения растворителя [1]. Объемную электропроводность σ_{dc} кристалла находили из спектров импеданса ($5–5\times10^5$ Гц, 290–520 К, вакуум). Энтальпия активации Li-ионного переноса ΔH_σ = 0.23±0.02 эВ, миграция ионов Li^+ происходит по вакантным позициям.

Поляризацию кристалла с омическими Ag-контактами задавали от источника постоянного напряжения -50 – +50 В. При охлаждении (до 4.2 К) кристалл α-$LiIO_3$ находится в состоянии термоэлектрета, длительно сохраняющим поляризационное состояние после снятия внешнего электрического поля. При нагреве 4.2–300 К релаксация заряда в α-$LiIO_3$ является термоактивированным процессом. Температурная зависимость индуцированной электрическим полем поляризации (рис. 1) описывается экспоненциальным законом с энтальпией активации ΔH_{rel} = 0.25±0.03 эВ.

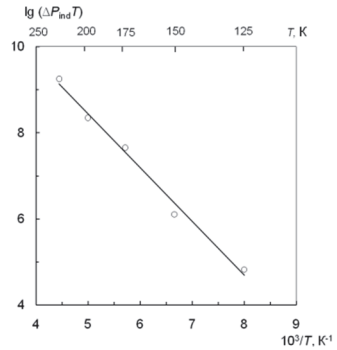


Рис. 1. Температурная зависимость $\ln(\Delta P_{ind}\times T)$, $10^3/T$ *для кристалла* α-$LiIO_3$.

Из равенства энтальпий релаксации ΔH_{rel} и проводимости ΔH_σ следует, что релаксационная деполяризация α-$LiIO_3$ вызвана перераспределением носителей заряда Li^+ в объеме кристалла. Температура начала активации Li-ионного переноса (T > 125 К) определяется дрейфовой скоростью ионов Li^+ и зависит от степени дефектности кристалла.

Работа выполнена по НИР ИК РАН № 01291153836 «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Шалдин Ю.В., Белогуров Д.А. и др. // Квантовая электроника, 1974, № 3, с. 510–515.

ФТОР-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ФОТОЛИТОГРАФИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ CaF_2

Сорокин Н.И.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Кристаллы CaF_2 высокого оптического качества являются перспективными для создания высокоразрешающих проекционных объективов при фотомеханическом способе (фотолитографии) изготовления печатной формы на поверхности кремневой пластины на рабочих длинах волн лазеров 248, 193 и 154 нм [1]. В работе изучена фтор-ионная проводимость фотолитографических кристаллов CaF_2.

Кристаллы CaF_2 получены из расплава методом Бриджмена по специальной технологии в ГОИ (СПб) [1]. Статическую объемную электропроводность σ_{dc} кристалла находили из спектров импеданса (5–5×10^5 Гц, 642–836 К, вакуум). Вкладом электронной и катионной проводимости в σ_{dc} кристалла можно пренебречь [2]. Ионная проводимость кристалла CaF_2 возрастает от 2.9×10^{-8} (642 К) до 5.6×10^{-6} См/см (836 К). Энтальпия активации фтор-ионного переноса составляет 1.656 ± 0.005 эВ и предэкспоненциальный множитель σ_{dc} равен 3.8×10^7 СмК/см при 701–836 К (область перехода от примесной к собственной σ_{dc}).

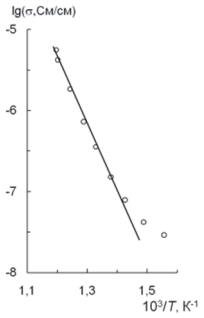


Рис. 1. Температурная зависимость $\sigma(T)$ *для фотолитографического кристалла* CaF_2.

Проводимость при 773 К (500°С) фотолитографического кристалла CaF_2 σ_{dc} = 7×10^{-7} См/см меньше σ_{dc} = 2×10^{-6} – 2×10^{-5} См/см измеренных в литературе кристаллов [3–6]. Это подтверждает высокую химическую чистоту и низкую дефектность фотолитографических кристаллов CaF_2.

Работа выполнена в рамках НИР № 01291153836 ИК РАН «Новые кристаллические и функциональные материалы».

[1] Бельский А.Б., Ган М.А. и др. // Оптич. журнал, 2009, том 76, № 8, с. 59-69.

[2] Levitskii V.A. // J. Solid State Chem., 1978, vol. 25, p. 9-22.

[3] Ure R.W. // J. Chem. Phys., 1957, vol. 26, p. 1363-1373.

[4] Захаров Г.М., Никитинская Т.И. и др. // ФТТ, 1959, том 1, № 5, с. 835-837.

[5] Bollmann W., Reimann R. // Phys. Stat. Sol. (a), 1973, vol. 16, p. 187-196.

[6] Reau J.M., Lucat C. et al. // J. Solid State Chem., 1976, vol. 17, p. 123-129.

ФТОР-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ $Ce_{0.995}Cd_{0.005}F_{2.995}$

Сорокин Н.И., Каримов Д.Н., Соболев Б.П.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
e-mail: nsorokin1@yandex.ru

Впервые изучена фтор-ионная проводимость σ_{dc} кристаллов $Ce_{0.995}Cd_{0.005}F_{2.995}$ со структурой LaF_3, в которых часть Ce^{3+} замещена на Cd^{2+} с 18-электронной оболочкой. Значения сравниваются с σ_{dc} $Ce_{0.995}M_{0.005}F_{2.995}$ с “жесткими” ионами ЩЗЭ (M^{2+}). Выбор CeF_3 обусловлен тем, что в ряду RF_3 (R - РЗЭ) σ_{dc} проходит через максимум на церии. Кристаллы получены [1] из расплава CeF_3 и CdF_2 (95 и 5 мол. %) методом Бриджмена. Скорость протяжки 3 мм/ч. В кристалле по атомно-абсорбционному анализу [1] ~ 0.5 мол. % CdF_2. Потери веса ~ 9 масс. % следует отнести к CdF_2.

Вхождение Cd^{2+} в изученный в кристалл доказано увеличением его радиационной устойчивости до 10^9 рад (на два порядка выше CeF_3) [2].

Анионная проводимость σ_{dc} кристалла изучена методом импедансной спектроскопии (1–10^6 Гц) в атмосфере азота при 323–1073 К и вакууме ~10^3 Па при 153–410 К. Погрешность σ_{dc} равна < 2 %. Блокирующий эффект от инертных (Ag) электродов в спектрах говорит об ионной проводимости.

Кристаллы $Ce_{0.995}Cd_{0.005}F_{2.995}$ сохраняются в метастабильном состоянии даже при кратковременном нагреве до 800 °С. Температурные исследования $Ce_{0.995}Cd_{0.005}F_{2.995}$ показали, что при 153–1073 К значения σ_{dc} возрастают в 10^9 раз, достигая σ_{dc} = 5×10^{-2} См/см.

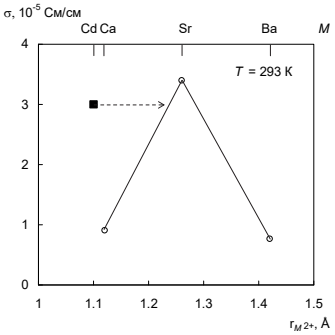


Рис. 1. Ионная проводимость при 293 К кристаллов $Ce_{0.995}M_{0.005}F_{2.995}$, M = Ca, Sr, Ba [2] *и* Cd *(эксперимент)*.

Проводимость σ_{dc} = 3×10^{-5} См/см кристалла $Ce_{0.995}Cd_{0.005}F_{2.995}$ в 10 раз выше матрицы CeF_3 и близка к σ_{dc} $Ce_{0.995}Sr_{0.005}F_{2.995}$ (*рис.1*). Это указывает на значительное влияние на σ_{dc} замещений Ce^{3+} на Cd^{2+} и преимущество последнего с точки зрения увеличения σ_{dc} перед Ca^{2+} и Ba^{2+}.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 14-03-00178 и 16-03-00707).

[1] Бритвич Г.И., Бучинская И.И. и др. // ПТЭ, 1992, № 6, с. 89–94.

[2] Сорокин Н.И., Соболев Б.П. // Электрохимия, 2007, том 43, № 4, с. 420–431.

ОПТИЧЕСКИЕ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА МИКРОТРУБОК LaF_3, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ “СВОРАЧИВАНИИ” СЛОЕВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА РАСТВОР СОЛИ ЛАНТАНА-ГАЗООБРАЗНЫЙ HF

Толстой В.П., Гулина Л.Б.

Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета

e-mail: v.tolstoy@spbu.ru

Фотонные кристаллы с анизотропными свойствами, как известно, могут быть образованы упорядоченной совокупностью 1D нано- или микроразмерных материалов, в том числе нано- или микротрубок.

В настоящем докладе впервые анализируются оптические и люминесцентные свойства микротрубок LaF_3 и $La_{1-x}Eu_xF_3$, которые были получены по оригинальной методике [1, 2] в результате высушивания на воздухе слоев соответствующих составов, синтезированных в результате реакции газообразного HF с поверхностью водного раствора соли лантана. В этих работах впервые было показано, что в результате такого взаимодействия на границе раздела образуется слой толщиной до 800 нм, состоящий из массивов, ориентированных нанолистов LaF_3 с кристаллической структурой тисонита и толщиной от 5 до 20 нм, определяемой условиями синтеза, который в процессе высушивания на воздухе “сворачивается” в микротрубки диаметром 20 - 80 мкм и длиной от 100 мкм и до 5 мм. Исследование микротрубок выполнено методами СЭМ, РСМА, ДТА, оптической микроскопии, рентгеновской дифракции, а также оптической спектроскопии пропускания и диффузного отражения, комбинационного рассеяния и люминесценции. Были изучены термические превращения при прогреве на воздухе и в инертной атмосфере и найдены такие условия синтеза и обработки, в результате которых образуются микротрубки $La_{0,95}Eu_{0,05}F_3$, проявляющие люминесцентные свойства (рис. 1).

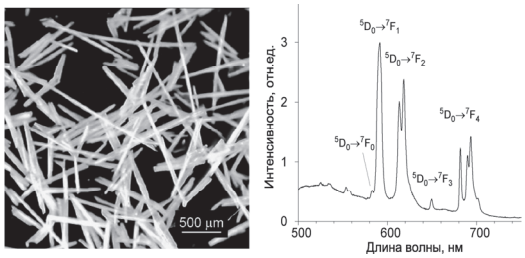


Рис.1. Микрофотография и спектр люминесценции микротрубок $La_{0,95}Eu_{0,05}F_3$.

В результате выполнения данной работы на основе полученных экспериментальных результатов построены модели анализируемых химических процессов и высказаны рекомендации по возможному практическому применению синтезированных микротрубок в составе фотонных кристаллов, оптических волноводов и др.

Работа поддержана грантом РНФ № 16-13-10223.

[1] Толстой В.П., Гулина Л.Б. // ЖОХ, 2014, том 84, № 8, с. 1243-1246.

[2] Gulina L.B., Tolstoy V.P., Kasatkin I.A., Petrov Y.V. // J. Fluorine Chem., 2015, vol. 180. p. 117-121.

Микросимпозиум 8. Меганаука. Состояние и перспективы. Российское измерение

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ КОМПЛЕКСА МЕТОДОВ С ВЫСОКИМ ПРОСТРАНСТВЕННЫМ, ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ И ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Брунков П.Н.[1,2], Романов А.Е.[1,2], Молодцов С.Л.[1,3,4], Пронин И.И.[1,2], Байдакова М.В.[1,2]

[1] *Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (ИТМО)*

[2] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН*

[3] *TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany*

[4] *European XFEL GmbH, Hamburg, Germany*

e-mail: brunkov@mail.ioffe.ru

В 2015 году в Университете ИТМО организован Транснациональный научно-образовательный UniFEL центр перспективных методов исследования материалов. Основным направлением работы UniFEL центра является разработка и исследование новых методов исследования структуры и функциональных свойств наносистем с высоким пространственным, энергетическим и временным разрешением с помощью комплекса методов, включающих источники синхротронного излучения и рентгеновские лазеры на свободных электронах (европейская и другие установки XFEL).

Развитие адекватных методов диагностики наноматериалов является одним из непременных условий создания и совершенствования нанотехнологий. Для выбора и корректировки условий синтеза наноструктур необходимо получение наиболее полной и количественно точной информации об основных физических и физико-химических параметрах и характеристиках на всех этапах технологического процесса получения наноструктур (элементный, фазовый и химический состав; параметры реальной кристаллической и электронной структуры; геометрические параметры; дефекты).

Для характеризации и исследования наносистем планируется использовать комплекс взаимодополняющих и взаимоконтролируемых методов диагностики, включающий растровую электронную микроскопию, просвечивающую электронную микроскопию, высокоразрешающую рентгеновскую дифрактометрию, рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию, а также сканирующую зондовую микроскопию. Будут получены данные об атомном строении, геометрической форме и размерах, элементном и фазовом составе и дефектах, электронной структуры материалов на основе детектирования и анализа сигналов, возникающих при взаимодействии электронных и рентгеновских пучков с наносистемами.

В докладе будут представлены результаты последних исследований наноуглеродных структур на основе графена с использованием комплекса методов, включающих источники мощного рентгеновского излучения [1,2].

[1] Rabchinskii M.K., Dideikin A.T., et al // Proceedings of The International Conference Laser Optics 2016 (LO), IEEE 2016, p. R10-7.

[2] Grebenyuk G.S., Vilkov O.Yu., et al // Applied Surface Science, 2017, Vol. 392, p. 715–722.

МОБИЛЬНЫЕ РОСТОВЫЕ УСТАНОВКИ ДЛЯ IN-SITU ФОРМИРОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЙ УНИКАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР И СИСТЕМ НА СОВРЕМЕННЫХ ИСТОЧНИКАХ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Гойхман А.Ю., Максимова К.Ю., Прокопович П.П.

ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. И. Канта»

e-mail: AGoikhman@kantiana.ru

В последние годы все больше in situ экспериментов по созданию и исследованию уникальных наноструктур проводится на современных установках Мегасайнс: нейтронных и синхротронных источниках, ультрафиолетовых и рентгеновских лазерах. Использование гибких ростовых методик в вакуумных камерах, соединенных с аналитическими приборами синхротронных источников открывают широкие возможности по исследованию новых эффектов на границах раздела наноструктур и созданию квантовых наноустройств электроники будущего, с использованием таких эффектов. Одним из наиболее гибких вакуумных методов формирования наносистем является метод импульсного лазерного осаждения (ИЛО), позволяющий осаждать на подложку практически любые материалы и их комбинации (при применении различных длин волн лазера) с атомарной тонностью контроля толщин [1]. Благодаря возможности выноса источника энергии для распыления мишени (лазера) за пределы камеры конфигурация системы ИЛО может быть легко оптимизирована под любую вакуумную аналитическую систему, в том числе и в виде мобильных (перемещаемых) ростовых установок.

В работе представлены оригинальные результаты использования ростовой установки ИЛО в сочетании с аналитическими возможностями станции P09 синхротрона PETRA III, в частности рентгеновского фото-электронного спектрометра (HAXPES). Также приводится некоторые варианты возможной реализации мобильных ростовых установок на синхротронных и нейтронных источниках, обсуждаются возможные преимущества и перспективы использования.

[1] R. Eason, Book: Pulsed Laser Deposition of Thin Films: Applications-Led Growth of Functional Materials, Wiley, 2007

ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР В ВОРОНЕЖСКОМ ГОСУНИВЕРИСТЕТЕ

Домашевская Э.П., Терехов В.А., Турищев С.Ю.
Воронежский государственный университет
e-mail: ftt@phys.vsu.ru

В процессе многолетнего использования синхротронного излучения источников BESSY II (Гельмгольц Центр Берлин, Германия) и SRC (Университет Висконсин Мэдисон, США) научной группой Воронежского государственного университета разработаны методические основы и проведена прецизионная диагностика большого ряда многофункциональных наноматериалов и гетероструктур.

Широкий круг проведенных исследований с использованием СИ для решения научных и технологических задач включал использование традиционных методов XANES и XPS для диагностики кремниевых структур с нанокристаллами и кластерами, многослойных наноструктур с магнитными слоями и различными прослойками, наноматериалов широкозонных оксидов олова, магнитных наноструктур никеля в диэлектрической матрице, гетероструктур A3B5, гибридных биоматериалов.

Выявлены структурно-фазовые превращения на межфазных границах и сложных поверхностях, доказана перестройка электронных спектров изученных материалов при переходе в наноразмерное состояние с проявлением новых функциональных свойств. Впервые обнаружены новые эффекты и их специфическое проявление при взаимодействии СИ в области нанометровых длин волн в виде интерференции и дифракции на нанообъектах, размеры которых хотя бы в одном направлении соизмеримы с длиной волны. Изучена специфика аномальных проявлений этих взаимодействий в условиях синхротронных экспериментов с изменением углов скольжения пучков СИ.

Применение новых современных методов изучения многофункциональных наноструктур, таких, как фотоэлектронная спектроскопия высоких энергий и фотоэмиссионная электронная микроскопия позволяет проводить эксперименты с высоким пространственным и энергетическим разрешением и получать ранее недоступную информацию с визуализацией магнитных свойств.

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И СПИНТРОНИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСТОЧНИКОВ СИ

Зенкевич А.В., Лебединский Ю.Ю., Матвеев Ю.А.
Московский физико-технический институт
e-mail: zenkevich.av@mipt.ru

По мере уменьшения толщин слоев в многослойной функциональной структуре до единиц нм, возникают новые свойства, определяемые границами раздела, которые могут быть использованы для создания инновационных устройств логики и памяти. В частности, явления обратимого переключения сопротивления в структурах метал-изолятор-металл лежат в основе устройств энергонезависимой памяти нового поколения, а также используются для разработки аппаратной базы для нейромофрных вычислений. С другой стороны, магнитоэлектрическое взаимодействие различной природы на границе раздела ферромагнетик (ФМ)/сегнетоэлектрик (СЭ) в композитных мультиферроиках может позволить управлять спиновой поляризацией электронов внешним электрическим полем СЭ, и использовано для создания как многофункциональных запоминающих устройств, так и устройств спиновой логики.

При исследовании физических и функциональных свойств границ раздела в многослойных наноструктурах особую роль играет использование синхротронного излучения (СИ). Развитые в последнее десятилетие методы с использованием СИ, в частности, HAXPES, XAS, XMCD, позволяют получать информацию о химической и электронной структуре, а также магнитных свойствах, захороненных (на глубине 5-15) нм границ раздела, что открывает возможность исследовать полностью функциональные прототипы устройств, в том числе, в процессе их работы (*in operando*). В докладе будут рассмотрены примеры [1] и планы использования методов на основе СИ для исследования функциональных наноструктур для наноэлектроники.

[1] A. Zenkevich et al.// J. Electron Spectr. Rel. Phenom., 2013, 190, 302; A. Zenkevich et al.// Appl. Phys. Lett., 2013, 102, 062907; A. Chernikova, et al.// ACS AMI, 2016, 8 7232-7237.

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ПРОГРАММА НИЯУ МИФИ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Менушенков А.П.
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия
e-mail: apmenushenkov@mephi.ru

Исследования с использованием синхротронного излучения в Московском инженерно-физическом институте были начаты в 1983 году, когда на синхротроне ADONE (Фраскати, Италия) был проведен первый в мире эксперимент по изучению локальной структуры сверхпроводящих оксидов $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$ методом рентгеновской спектроскопии поглощения EXAFS (см. A.Balzarotti, A.P.Menushenkov, N.Motta, J.Purans Solid State Commun. 49 1984 887). За прошедшие годы сотрудниками МИФИ выполнены десятки научных проектов в следующих синхротронных центрах: ИЯФ СО РАН, КИСИ НИЦ «Курчатовский институт», LURE (Орсэ, Франция), DORIS-III и PETRA-III (DESY, Гамбург, Германия), MAX-lab (Лунд, Швеция), BESSY-II (Берлин, Германия), ESRF (Гренобль, Франция), SOLEIL (Эсон**,** Франция).

При проведении экспериментов используются следующие современные методы: EXAFS- и XANES-спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS), аномальная рентгеновская дифракция, резонансное неупругое рентгеновское рассеяние (RIXS), анализ парной функции радиального распределения атомов (PDF), рентгеновский магнитный круговой дихроизм (XMCD), исследования вещества в экстремальных условиях.

В программе исследований важное внимание уделяется изучению материалов, представляющих значительный интерес как для фундаментальной науки, так и для практического использования, таких как высокотемпературные сверхпроводящие оксиды и высокотемпературные сверхпроводники на основе железа, наноструктуры с квантовыми точками, соединения редкоземельных элементов с промежуточной валентностью, сплавы с эффектом памяти формы, дибориды металлов, магнитные сплавы с фазовыми магнитными переходами и высокой коэрцитивной силой, сложные наноструктурированные оксиды на основе редкоземельных металлов, магнитные структуры на основе кобальта, фосфора и мышьяка и др.

В результате проведенных исследований опубликовано более 100 статей в ведущих российских и зарубежных научных журналах и сделано более 150 докладов на международных и национальных научных конференциях.

СТРУКТУРНАЯ БИОЛОГИЯ МЕМБРАННЫХ БЕЛКОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ИСТОЧНИКОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Мишин А.В., Борщевский В.И., Рогачев А.В., Черезов В.Г., Горделий В.И.
Московский физико-технический институт (государственный университет) (МФТИ)
e-mail: borshchevskiy@gmail.com

В МФТИ проводится ряд исследований, связанных с изучением структуры и функций мембранных белков. Одним из направлений является исследование рецепторов, сопряжённых с G белком (GPCR). Эти рецепторы выполняют множество принципиально важных функций в человеческом организме и являются мишенями до 40% лекарственных препаратов. Для того, чтобы установить молекулярные механизмы функционирования этих рецепторов, необходимо знать их структуру с высоким разрешением. Для этого мы используем рентгеноструктурный анализ кристаллов GPCR с использованием микрофокусных станций европейского синхротронного источника рентгеновского излучения 3-его поколения (European Synchrotron Radiation Facility, ESRF), а также рентгеновского лазера на свободных электронах в Стэнфорде (X Ray Free Electron Laser, XFEL).

Другим направлением в МФТИ является исследования и разработки инструментов для оптогенетического управления нейрональными клетками. Недавно нашими исследователями была получена структура уникальной фотоактивируемой натриевой помпы KR2 из *Krokinobakter eikastus*. Данная структура позволяет предсказать путь транспорта иона и открывает возможность рационального дизайна катионных насосов с желаемыми свойствами для целей оптогенетического контроля. Структурно-биологический подход, в комбинации с оптической спектроскопией помогает создавать оптогенетические инструменты, обладающие оптимальными характеристиками и нужной селективностью. Появление XFEL также позволит проводить не только структурные, но и времяразрешённые кинетические исследования данных мембранных белков.

[1] Gushchin I, Shevchenko V, Polovinkin V, Kovalev K, Alekseev A, Round E, Borshchevskiy V, et al «Crystal structure of a light-driven sodium pump». Nat. Struct. Mol. Biol. 22, 390–U61. 2015.

[2] Batyuk A., L. Galli, A. Ishchenko, G.W. Han, C. Gati, P.A. Popov, M.-Y. Lee, B. Stauch, T.A. White, et al. «Native Phasing of X-ray Free-electron Laser Data for a G Protein-coupled Receptor.» Science Advances 2.9 (2016).

[3] Mishin, A.V., A.P. Luginina, A.P. Potapenko, V.I. Borshchevskiy, V. Katritch, E. Edelweiss, I.S. Okhrimenko, V. I. Gordeliy, and V.G. Cherezov. «Expression and Purification of an Engineered Human Endothelin Receptor B in a Monomeric Form.» Dokl Biochem Biophys Doklady Biochemistry and Biophysics 467.1 (2016): 157-61.

РОССИЙСКО-ГЕРМАНСКИЙ КАНАЛ (RUSSIAN-GERMAN NANODIFFRACTION BEAMLINE) НА ИСТОЧНИКЕ PETRA III

Новиков Д.В., Раабе Я., Друбе В.
DESY Photon Science Division, German Electron Synchrotron DESY, Hamburg, Germany
e-mail: dmitri.novikov@desy.de

Российско-Германский канал синхротронного излучения на накопительном кольце третьего поколения PETRA III создан в рамках двусторонней научной программы «Развитие и применение источников излучения на основе укорительных технологий» при непосредственном участии НИЦ «Курчатовский Институт», Института кристаллографии РАН и Немецкого синхротронного центра ДЕЗИ. Конструкторские работы по его реализации начаты в 2014 году, запуск в эксплуатацию намечен на начало 2017 года.

Канал предназначен для исследований процессов и устройств на основе наноразмерных структур и технологий с применением рентгеновской дифрактометрии и методов когерентного рассеяния. Основной акцент в научной программе Российско-Германского канала будет делаться на изучении путей протекания сложных физических и химических процессов в материалах и реальных устройствах под воздействием внешних физических полей, температуры, импульсов лазерного излучения и других факторов.

Создание канала позволит проводить фундаментальные, прикладные и технологические исследования в области материаловедения наносистем, гибридных и биомедицинских приложений, а также выполнять отработку методик и проведение тестовых экспериментов перед их реализацией на лазерах на свободных электронах.

Набор методов исследования, реализованных на Российско-Германском канале, оптимальным образом взаимно дополняет возможности, предоставляемые станциями Курчатовского источника синхротронного излучения.

К одной из основных целей проекта относится создание долгосрочных совместных программ с российскими научными организациями и, в особенности, российскими университетами. В рамках участия университетов в работе канала предусмотрена возможность проведения образовательных курсов, а также выполнение совместных дипломных и кандидатских работ.

РОЛЬ СИ В СОВРЕМЕННОЙ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

Самыгина В.Р.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: lera@ns.crys.ras.ru

Благодаря стремительному развитию биотехнологий в последнее десятилетие, круг объектов, которые могут быть исследованы методами структурной биологии существенно расширился. Помимо классических исследований структур водорастворимых белков и нуклеиновых кислот значительно увеличилось количество работ по расшифровке структур мембранных белков, вирусов, белок-белковых комплексов, комплексов белков с нуклеиновыми кислотами и одних из самых сложных мультикомпонентных биологических объектов – рибосом. За исследование структуры и функции рибосом в 2009 году была вручена Нобелевская премия по химии.

Значимую роль в успехах современной структурной биологии играет использование источников синхротронного излучения 4-ого поколения. Их весомым преимуществом является использование автоматизированные системы смены образцов, применение мощного микрофокусного пучка для получения дифракционных данных с микрокристаллов (~10 мкм) и детекторы нового поколения (PILATUS). Все это позволило существенно увеличить количество наборов данных, которые могут получить пользователи за час. В результате стала актуальна автоматическая обработка данных, которая практикуется, в частности, на станциях СИ ESRF.

Благодаря всем этим преимуществам стало возможным получать структурную информацию от микрокристаллов и крупных макромолекулярных объектов, не обладающих высоким внутренним порядком, а также получать структуры с ультравысоким разрешением. Рассматриваются примеры использования станций СИ современных синхротронов для решения структурно-биологических задач.

3D ПИКОМЕТРОВАЯ ДИАГНОСТИКА ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ БЕЗ ДАЛЬНЕГО ПОРЯДКА

Солдатов А.В., Смоленцев Г.Ю., Гуда А.А., Солдатов М.А.
Южный федеральный университет
e-mail: soldatov@sfedu.ru

Изучение наноразмерной атомной структуры перспективных материалов без дальнего порядка важно, как с фундаментальной точки зрения для понимания природы физических и химических свойств материалов, так и для прикладных исследований в качестве основы для синтеза новых наноматериалов с необходимыми свойствами. Разработана новая методика для определения параметров 3D локальной атомной структуры материалов на основе передовых методов суперкомпьютерного теоретического анализа данных спектроскопии рентгеновского поглощения в ближней к краю области (XANES), в том числе используя спектроскопию XANES с высоким энергетическим разрешением, которая реализуется на источниках синхротронного излучения последнего поколения. Особенностью метода является то, что он позволяет неразрушающим образом определять не только межатомные расстояния в материалах без дальнего порядка, но и изучать угловое распределение атомов. Продемонстрирована возможность определения межатомных расстояний в материалах без дальнего порядка в расположении атомов с точностью до 1 пикометра и выше. В рамках этого подхода рассматриваются результаты современных исследований локальной атомной структуры для нескольких типов перспективных классов наноматериалов. В докладе также описывается современное состояние методов теоретического анализа экспериментальных спектров рентгеновского поглощения для извлечения структурных параметров.

Следует отметить, что в настоящее время прогресс в развитии источников синхротронного излучения открывает возможности для изучения динамики атомной и электронной структур, то есть удается проводить исследования не только в статических условиях, но и для процессов, в том числе длящихся менее наносекунды. Еще одним вектором интенсивного развития настоящего метода является появление на современных источниках синхротронного излучения последнего поколения возможности получения информации о малых локальных областях исследуемых материалов. В докладе также описываются возможности применения настоящего метода при проектировании специализированных станций для отечественного источника синхротронного излучения 4 поколения.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ГРАФЕНА

Усачёв Д.Ю.
Санкт-Петербургский государственный университет
e-mail: Dmitry.Usachov@spbu.ru

Источники синхротронного излучения (СИ) являются мощными инструментами для изучения структуры и свойств материалов, и в частности графена. Целью данной работы является обзор полученных в СПбГУ результатов исследований материалов на основе графена, где ключевую роль в определении свойств играют методы с использованием СИ.

Для широкого практического использования графена необходимо иметь возможности управлять шириной запрещенной зоны, типом и концентрацией носителей заряда, стимулировать спиновое расщепление электронных состояний, и др. Для достижения этих целей разработаны подходы, основанные на изменении свойств графена при контакте с другими материалами, адсорбции и внедрении примесей [1-5]. Основные результаты получены следующими методами с использованием СИ.

С помощью NEXAFS-спектроскопии доказано внедрение примесей N и B в планарную структуру графена [2,5].

С помощью фотоэлектронной дифракции доказано формирование нового материала – ассиметрично легированного графена, в котором примесь внедрена в одну из двух углеродных подрешеток (Рис. 1), что открывает новые возможности управления шириной запрещенной зоны [1,2].

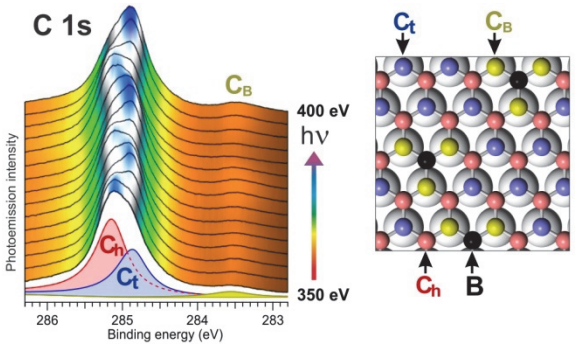


Рис.1. Спектры фотоэмиссии легированного бором графена на поверхности Co(0001) и структурная модель системы.

Методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) определено влияние примеси азота на электронную структуру и концентрацию носителей заряда в графене [4,5].

Использование ARPES со спиновым разрешением позволило доказать существование спин-поляризованных интерфейсных состояний в контакте графен-ферромагнетик [3].

[1] D. Usachov et al. // Nano Lett., 2016, v. 16, p. 4535.
[2] D. Usachov et al. // ACS Nano, 2015, v. 9, p. 7314.
[3] D. Usachov et al. // Nano Lett., 2015, v. 15, p. 2396.
[4] D. Usachov et al. // Nano Lett., 2014, v. 14, p. 4982.
[5] D. Usachov et al. // Nano Lett., 2011, v. 11, p. 5401.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОБЛЕМА РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛАЗЕРАХ

Шайтан К.В.
МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва 119991
e-mail: Shaytan49@yandex.ru

Создание рентгеновских лазеров на свободных электронах и соответствующей техники измерения рассеяния рентгеновских квантов на нерегулярных биологических объектах (единичные макромолекулы, их комплексы и клеточные структуры) в перспективе могут открыть новую эру в структурной биологии – изучение структуры и динамики биомакромолекул *in vivo* (в живой клетке). Необходимым условием для этого является наличие инструментов для обработки картины рассеяния и выделения структурной информации из получаемых практически мгновенных “фотографий” объекта с варьируемой временной задержкой. Ценность такой биологической информации трудно переоценить. До настоящего момента наши знания о структуре белков и динамике функционального акта ограничены экспериментами, в которых объект выделен из естественной среды (клетки) и переведен в специальные условия, диктуемые требованиями физического метода. Переход к получению структурной информации *in vivo* потребует решения сложной обратной задачи рассеяния, для регуляризации которой необходимо выполнить целый комплекс теоретических работ и развить соответствующие математические методы. Отметим в их числе:

- предсказание с достаточно высокой стпенью точности (порядка 70-80%) структур белков (и других биополимеров) как по основной последовательности, так и по вариации структуры по сравнению, например, с кристаллической при условии помещения в комплекс или клеточное окружение;
- методы фильтрации картины рассеяния для выделения сигнала от структур с близкой геометрией (или конформацией).

Не имея возможности подробно останавливаться на достаточно обширном комплексе задач заметим, что одним из узких и ресурсоемких мест для развития инструментов регуляризации обратной задачи рассеяния в обсуждаемом контексте является моделирование вероятных структур белков (других биополимеров и их комплексов) с приемлемой точностью. Здесь возможно, в частности, использование методов моделирования структуры по гомологии. Но эти методы не применимы для негомологичных белков и для оценки вариации структуры при изменении условий. Наиболее прямую и ценную в этом плане информацию дают методы молекулярной динамики, развитие которых в направлении решения задач фолдинга (сворачивания биополимеров в работоспособную пространственную структуру) демонстрирует обнадеживающие перспективы.

Автор признателен М.П.Кирпичникову и А.Т.Фоменко за полезные обсуждения и поддержку. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (уникальный идентификатор проекта RFMEFI61614X0003).

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЖЕСТКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ. ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В СЦСТИ

Шмаков А.Н.[1,2,3], Винокуров З.С.[1], Селютин А.Г.[1], Купер К.Э.[2]
[1] Институт катализа им.Г.К.Борескова СО РАН
[2] НИнститут ядерной физики им.Г.И.Будкера СО РАН
[3] Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
e-mail: A.N.Shmakov@inp.nsk.su

Использование жесткого рентгеновского излучения с энергией квантов 40÷100 кэВ в рентгеноструктурном анализе имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционно используемым сравнительно мягким излучением с энергией ~8÷20 кэВ. Во-первых, в случае жесткого излучения уменьшаются углы дифракции, и основная часть структурной информации оказывается заключенной в небольшом угловом интервале. Например, при энергии излучения ~60 кэВ диапазон векторов рассеяния 4□sin□/□ в интервале углов дифракции 2□~20° составляет ~100 нм$^{-1}$, что превышает диапазон углов, в котором может быть зарегистрирована дифракционная картина при энергии фотонов ~8 кэВ. Во-вторых, существенно возрастает проникающая способность излучения с высокой энергией, что позволяет получать рентгенограммы образцов, находящихся внутри различных устройств, например, в камерах высокого давления, электрохимических ячейках, автоклавах и т.д. В-третьих, широкий диапазон векторов рассеяния, обеспечиваемый коротковолновым излучением, дает возможность применения метода интегрального анализа дифракционной картины, т.е. получения функций радиального распределения электронной плотности. В этом случае с ростом энергии излучения повышается разрешающая способность и чувствительность метода. Наконец, в-четвертых, в области энергий ~80÷100 кэВ лежат *K*-края поглощения тяжелых элементов, таких как Pt и Au, и появляется возможность использования в дифракционных исследованиях резонансных эффектов вблизи *K*-краев поглощения этих элементов.

В Сибирском Центре Синхротронного и Терагерцового Излучения (СЦСТИ) на накопителе электронов ВЭПП-4 были проведены первые эксперименты по дифракции с использованием излучения с энергией квантов ~55 кэВ. Были получены рентгенограммы стандартного образца SRM676 (корунд), а также ряда образцов различного состава. Для стандартного образца корунда была получена функция радиального распределения электронной плотности. В докладе обсуждаются результаты первых экспериментов, а также перспективы использования жесткого излучения для проведения исследований методом рентгеновской дифракции *In Situ* и *Operando*.

SINGLE CRYSTAL OPTICS AT HIGH REPETITION RATE X-RAY FREE ELECTRON LASERS

Samoylova L., Sinn H.
European X-ray Free Electron Laser Facility
e-mail: liubov.samoylova@xfel.eu

European X-ray Free Electron Laser (XFEL) in Hamburg will start operation in the beginning of 2017. It will deliver ultra-short X-ray pulses with high repetition rate up to 4.5 MHz, which are grouped into 10-Hz pulse trains of up to 10 kW power each. The talk will summarize the development status and envisioned applications of single crystal based diffraction optics at the high repetition rate European XFEL.

In particular, beam conditioning at three of the six end stations at European XFEL will use the high heat load silicon double crystal monochromators [1]. We will present design features of these monochromators and discuss their operational limits.

Besides, X-ray self-seeding scheme foreseen for the hard X-ray undulator at the European XFEL facility will involve Bragg diffraction on a thin diamond plate. Existing monochromator set-ups cannot accommodate severe heat load due to high repetition rate of European XFEL. We therefore plan to employ a new design based on direct contact between two polished single crystal diamond plates, with a 100 um thick high quality crystal acting as the actual monochromator, and the other used as a holder and heat sink. Here we report on an experimental study of this new setup. The experiment was carried out at ESRF beamline ID06, with white undulator radiation used to provide heat loads comparable with the average power of XFEL beam pulse train [2]. The results show that implemented design is deformation-free, mechanically stable and capable of accommodating power levels exceeding the peak value expected for European XFEL. In the presentation, the impact of irradiative and conductive heat transfer on cooling efficiency and further setup improvements will be discussed.

Finally, I will report on an application of bent ultra-thin high-quality diamond crystals in a single-shot spectrometer capable of withstanding the ultra-high heat load. A prototype spectrometer based on bent diamond crystals has been successfully tested at the Linac Coherent Light Source this year [3].

[1] Sinn H., et al.: Conceptual Design Report: X-ray Optics and Beam Transport, European XFEL (2011) (doi 10.3204/XFEL.EU/TR-2011-002).

[2] Samoylova L., et al, H. Abstracts of SRI2015 (2015), p.135

[3] Boesenberg, U., et al, *X-ray spectrometer based on a bent diamond crystal for free-electron laser applications*, in preparation

COHERENT X-RAY REFRACTIVE OPTICS FOR NEW DIFFRACTION LIMITED X-RAY SOURCES

Snigirev A.A.
Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia
e-mail: anatoly.snigirev@gmail.com

After the first successful experimental demonstration 20 years ago [1], the use of X-ray refractive optics has rapidly expanded and they are now in common use at 15 synchrotrons in 10 countries. This development has intensified after the successful implementation of transfocators - tunable devices based on refractive lenses [2]. In addition to traditional micro-focusing applications, the transfocators can provide the following beam conditioning functions in the energy range from 3 to 200 keV: condensers with a tunable beam size, micro-radian collimators, low-band pass filters - monochromators [2], high harmonics rejecters [3], Fourier transformers [4].

New advanced parameters of the beam provided by the diffraction-limited sources – XFELs and new synchrotrons with the reduced horizontal emittance will open up a unique opportunity to build up a new concept for the loss-free beam transport and conditioning systems based on in-line refractive optics. Taking an advantage of the substantially reduced horizontal source size and the beam divergence, these new systems integrated into the front-end can transfer the photon beam almost without losses from the front-end to any further secondary optical systems (mirrors, crystals, lenses etc.) or directly to the end-stations. Evidently, beamlines will benefit from the possibility to include the active moveable lens systems in the front-ends. In this regard, development of diamond refractive optics is crucial [5-7]. The implementation of the lens-based beam transport concept will significantly simplify the layout of majority of the new beamlines [8], opening new opportunities for the material science research under extreme conditions [9, 10]. It will also allow a smooth beamlines transition from the present beam parameters to the upgraded ones, avoiding major optics modifications [11].

The field of applications of refractive optics is not limited to beam conditioning, but can be extended into the area of Fourier optics, as well as coherent diffraction and imaging techniques [12-15]. Using the intrinsic property of the refractive lens as a Fourier transformer, the coherent diffraction microscopy and high-resolution diffraction methods have been proposed to study 3-D structures of photonic crystals and mesoscopic materials [16–18].

Another promising direction of refractive optics development is in-line X-ray interferometry. Recently proposed bi- and multi-lens interferometers can generate an interference field with a variable period ranging from tens of nanometers to tens of micrometers [19, 20]. This simple way to create an X-ray standing wave in paraxial geometry opens up the opportunity to develop new X-ray interferometry techniques to study natural and advanced man-made nano-scale materials, such as self-organized bio-systems, photonic and colloidal crystals, and nano-electronics materials. As a classical interferometer, it can be used for phase contrast imaging and radiography. Finally, it can be useful for the coherence characterization of the high energy X-rays sources [21].

[1] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, et al, Nature, 384, 49 (1996).

[2] G.B.M. Vaughan, et al, J. Synchrotron Rad., 18, 125 (2011).

[3] M. Polikarpov, et al, J. Synchrotron Rad., 21, 484 (2014).

[4] M. Lyubomirskiy, et al, Optics express, 24, 13679 (2016).

[5] M. Polikarpov, et al, J. Synchrotron Rad., 22, 23 (2015).

[6] S. Terentyev, V. Blank, et al, Appl. Phys. Let., 107, 111108 (2015).

[7] M. Polikarpov, et al, AIP Conference Proc., 1741, 040024, 2016.

[8] M. W. Bowler et al, J. Synchrotron Rad., 22, 1540 (2015).

[9] N. Dubrovinskaia , et al, Sci. Adv., 2, e1600341, (2016).

[10] F. Wilhelm, et al, High Pressure Research, 36, 445 (2016).

[11] Orange Book “ESRF Upgrade programme Phase II 92015-2022), Technical Design Study”, G. Admans et al, eds., (2014).

[12] V. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, Opt. Comm., 216, 247 (2003).

[13] M. Drakopoulos, J. Schilling, Appl. Phys. Lett., 86, 014102 (2005).

[14] P. Ershov, S. Kuznetsov et al, Appl. Cryst., 46, 1475 (2013).

[15] H. Simons, et al, Nature Communications, 6, 6098 (2015).

[16] A. Bosak, I. Snigireva, A. Snigirev, Adv. Mater., 22, 3256 (2010).

[17] D. V. Byelov, et al, RSC Advances, 3, 15670.V (2013).

[18] V. Kohn, I. Snigireva, et al, J. Synchrotron Rad., 21, 729 (2014).

[19] A. Snigirev et al, Phys. Rev. Lett., 103, 064801 (2009).

[20] A. Snigirev, et al, Optics express, 22(21), 25842 (2014).

[21] M. Lyubomirskiy, et al, J. Synchrotron Rad., 23, 1104 (2016).

Алфавитный указатель авторов

А

Абакумов А.М. 19
Абгарян К.К. 52
Абдулвахидов Б.К. 381
Абдулвахидов К.Г. 381
Абдуллаев С.Д. 409
Абин Д. 336
Абин Д.А. 331, 337
Абраамян А.С 177
Абрамзон М.Г. 279
Абрамова Е.Н. 52
Абрамчик Ю.А. 235, 262
Авакян Л.А. 319
Авдеев М.В. 54, 155, 185, 197, 250, 362
Авдеева В.В. 171
Аверьянов Д.В. 83, 83
Аветисов И.Х. 314, 319, 406
Аветисов С.Э. 198
Авилов А.С. 126, 179, 400, 412
Агапова Ю.К. 227, 228
Агеев О.А. 79, 404
Адрожа Д.Т. 31
Азаров Е.С. 290
Азиева А.М. 274
Азизова К.К. 53
Айбуш А.В. 227
Айдинян Н.В. 82
Акилин О.В. 117
Акимова К.А. 133
Акимова О.В. 117
Акиндинов А. 395
Аккуратов В.И. 141, 192
Акмалова Ю.А. 148, 161
Акованцева А.А. 379, 401
Аксенов В.Л. 54, 148, 155, 197, 298, 362
Аксенов С.М. 51, 53, 63, 77, 101, 101, 103, 89, 138, 186
Александров П.А. 110
Александрова О.И. 283
Алексеев А.А. 186
Алексеев П. 151
Алексеев П.А. 31, 44, 186
Алексеева О.А. 19, 41, 50, 91, 105
Алиев И.Ш. 100, 398
Алиев Р.О. 239
Алиева М.Х. 53
Алмаши Л. 54
Алпатова А.В. 313
Алтухов Д.А. 227, 228
Алфимов М.В. 310, 311
Альмяшева О.В. 59
Альшиц В.И. 20, 23
Аляткин С.Ю. 313
Амеличев В. 336
Амирасланов И.Р. 53
Амиров А.М. 366
Амирханов И.В. 387
Амитонова Л.В. 275
Ананьев С.А. 103
Анашкина А.А. 256
Андреев А.А. 343
Андреев А.В. 139
Андреев В.Г. 365, 384
Андреев П.В. 54, 406
Андреева А.В. 20
Андреева М.А. 118, 149
Аневский С.И. 150
Аникин А.С. 186
Анищик В.М. 134
Анохин К.В. 267, 269, 271, 272, 273, 274, 275, 276, 276
Антипенко А.В. 290
Антипин А.М. 19, 60, 162
Антипов Е.В. 11
Антонов Б.Д. 369
Антонов Е.Н. 347, 351
Антонов М.Ю. 260
Анциферова А.А. 351, 365
Аракелян С.М. 111, 325
Аракчеев А.С. 142
Аргымбек Б.К. 365
Армеев Г.А. 197, 221
Аронзон Б.А. 95
Аронов А.Н. 90, 95
Арсентьев К.Ю. 47, 211
Арсентьев М.Ю. 372
Арсеньев А.С. 198, 212, 226
Артемов В.В. 59, 105, 214, 363, 418
Артемьев А.Н. 150
Артемьев И.В. 254
Артемьев А.Н. 148
Артемьев В.К. 107
Артемьев Н.А. 148, 150
Артикульный А.П. 54
Артюшенко М.Н. 314
Асадов С.М. 317
Асадчиков В.Е. 118, 119, 122, 125, 144, 151, 165, 186, 202
Асланов Л.А. 49, 297, 307
Асланян А.А 178
Астафьев А.А. 227
Астафьев С.Б. 151
Астахов В.А. 365, 384
Асташкин Р.О. 248
Асхабов А.М. 21
Атаев М.Б. 330, 366
Аткнин И.И. 152
Аульченко В.М. 142
Афанасьев А.Н. 267
Афанасьев М.С. 164
Афоникова Н.С. 55
Афонина Ж.А. 229
Ашарчук И.М. 313, 320

Б

Бабанов Ю.А. 149
Бабаян А.З. 178
Бабкин Д.Н. 211
Багдасарян А.С. 178
Багдасарян Э.Г. 178
Баграташвили В.Н. 126, 311, 343, 347, 352, 357, 379
Багров Д.В. 229, 241
Бадранова Г.У. 228, 354
Бажанов Д.И. 52
Байдакова М.В. 431
Баймухаметов Т.Н. 229
Байрамуков В.Ю. 387
Бакиров А.В. 235
Баклагина Ю.Г. 38
Бакунов М.И. 403
Балабаев Н.К. 254
Балагуров А.М. 23, 107, 153, 154, 167
Балагуров Д.А. 154
Балаев В.В. 210, 230
Балашова Е.В. 352, 375
Балбашов А.М. 163
Балларино А. 325
Балобанов В.А. 215
Балуян Т.Г. 251
Бальжанова Ю.В. 291
Банишев А.А. 395
Банишев А.Ф. 395
Барабаненков М.Ю. 417, 417
Барабаненков Ю.Н. 417
Баранникова С.А. 329
Баранов В.В. 95
Баранчиков А.Е 143, 216, 360
Баратова Л.А. 158
Барачевский В.А. 307
Бардакова К.Н. 343
Баринов С.М. 112
Баскаков А.О. 367
Баскаков Е.Б. 46
Баскакова С.С. 12, 31, 55, 64
Басков А.В 221
Батурин В.С. 49
Баулин Р.А. 149
Баум О.И. 198, 221, 226
Бедин С.А. 363, 384
Безбах И.Ж. 46
Безматерных Л.Н. 50, 105, 405
Безсуднова Е.Ю. 199, 250
Белов А.Ю. 21

Белов И.В. 353, 396
Белова Н.Е. 110
Белогорохов И.А. 367, 368, 368
Белогорохова Л.И. 367, 368, 368
Белозерова Н.М. 369
Белозерова О.Ю. 92, 94
Белоногов Е.К. 379
Белопольская А.В. 221
Белослудцев А.В. 22
Белоус А.Г. 250
Белоусов С.И. 355, 370, 381
Белоусова О.Л. 62
Белугина Н.В. 30
Белушкин А.В. 119
Бельтюков А.Н. 314
Беляев А.Д. 148
Беляков В.А. 153
Бендрышев Ю.Н. 46
Бердоносов П.С 56
Бердыев Б.Б. 253
Березкин В.В. 59
Бескровный А.И. 153, 239
Бессас Д. 151
Бессонов Д.А. 23
Бессонова Н.П. 365
Бирюков Я.П. 56
Благов А.Е. 11, 130, 137, 141, 152, 154, 169, 173, 183, 192, 204, 230, 236, 255, 280
Бланк В.Д. 359
Блантер М.С. 353
Блатов В.А. 80
Блинов Л.М. 310, 313, 321, 418
Бобков С.А. 120
Бобриков И.А. 23, 107, 154, 239
Богачева Е.Н. 158
Богдан Н.О. 376
Богданова Л.А. 92, 94
Богданова М.В 418
Богдашкина Д.В. 251
Богдзель А.А. 153
Боднарчук В.В. 321
Боднарчук В.И. 155, 185
Бозин Т.Н. 231
Бойко А.М. 24
Бойко И.И. 320
Бойко К.М. 199, 199, 218, 227, 228, 250, 261
Бойко М.Е. 24
Бойкова А.С. 230, 236, 247
Бокучава Г.Д. 120, 371
Болдырева Е.В. 24, 77, 190, 297
Болотина Н.Б. 25, 62, 72, 73, 110, 425
Большаков А.П. 182, 401, 407
Большунов А.В. 198
Бончук А.Н. 199
Боргардт Н.И. 121
Борголов А.В. 231
Борисевич А.Е. 397
Борисов Е.Н. 109
Борисов М.М. 122, 186
Борисова П.А. 89, 155, 353
Боровикова Е.Ю. 63
Бородина Т.Н. 201, 244
Бороненко М.П. 316
Борщев О.В. 41, 91, 316
Борщевский В.И. 248, 433
Боряков А.В. 109
Боттура Л. 325
Бочаров С.Н. 57, 62, 88
Бочаров Э.В. 198, 200, 227, 228, 231
Бочарова О.В. 198
Бражкин В.В. 353
Бржезинская М.М. 344
Брунков П.Н. 431
Брылев Д.А. 186
Бубнова Р.С. 56, 57, 62, 68, 111, 113
Бугаев А.Л. 319
Бугаев Л.А. 319, 381
Бугров А.Н. 360
Бузанов О.А. 404, 414
Бузин А.И. 200, 244
Бузмаков А.В. 122, 125, 144, 151, 165, 186
Бузник В.М. 379
Букреева Т.В. 201, 214, 216, 237, 244, 247, 380
Булавин Л.А. 54, 155, 179, 197, 250
Булгаков В.П. 209
Булкин А.П. 186
Бункин А.Ю. 58
Бурдаков А.В. 142
Буренков Г. 219
Бурзо Э. 102
Бурнышева К.М. 256
Бусев С.А. 362
Буташин А.В. 37, 151
Бычинский В.А. 211
Бычков А.Ю. 93
Бютье Г. 133

В

Вавилова Е.А. 74
Вагнер А.Р. 170
Важенцев А.И. 138
Вазина А.А. 124, 201
Вакулов З.Е. 404
Валеев В.Г. 156, 158, 174
Валеев Р.Г. 314
Валиев Э.З. 146
Вальковский Г.А. 58
Ванецев А.С. 308
Вартаньянц И.А. 120, 124, 190, 421
Вартанян Н.А. 248
Василевская А.К. 59
Василов Р.Г. 228, 231
Васильев А.Б. 59
Васильев А.Л. 36, 83, 83, 99, 110, 119, 123, 131, 182, 189, 189, 229, 237, 249, 281, 292, 325, 332, 332, 333, 337, 355, 360, 383
Васильев В.Б. 219, 404
Васильев В.Д. 201
Васильев Р.Б. 60
Васильева А.А. 201
Васильева Н.А. 60
Васильевский И.С. 61, 326, 331
Васильченко В.А. 201
Васин Р.Н. 107
Васина Е.С. 356
Вацюк А.В. 144
Ведерников А.И. 310
Векилов Ю.Х 174
Велигжанин А.А. 117, 142, 156, 167, 169, 282, 283, 284, 289, 389
Великодворская Г.А. 238
Величковский Б.Б. 245
Величковский Б.М. 261, 268, 268, 272, 275
Верезуб Н.А. 25, 26, 61
Верин И.А. 19, 50, 72, 105, 110, 162, 163
Верченко В.Ю. 66
Ветошкин В.М. 314
Визманн И. 145, 192
Вилле Г.Х. 151
Вильхельм Ф. 180
Виниченко А.Н. 61, 326, 331
Виноградов А.В. 405
Винокуров З.С. 436
Винс В.Г. 26, 388
Вихарев А.Е. 57, 62
Владимиров Ю.А. 247
Власенко В.Г. 384
Власенко Д.Е. 302
Власик П. 102
Власкина А.В. 227, 228, 232
Власов В.Н. 107
Власов В.П. 37
Власов Д.Ю. 208
Вознесенский С.С. 202
Войцеховский А.В. 396
Волков А.Г. 63

Волков А.С. 63
Волков В.В. 55, 123, 172, 186, 292
Волков М.П. 338
Волков Н.В. 405
Волков П.А. 397
Волков П.В. 332
Волков С.Н. 62, 113
Волков Ю.О. 119, 202
Волкова О.С. 112
Волкова Ю.А. 247
Волковский Ю.А. 230, 405
Вологжанина А.В. 171
Волох О.И. 222
Волошин А.Э. 12, 25, 26, 31, 41, 55, 60, 61, 64, 93, 103, 182
Волчков И.С. 64, 400
Волынцева А.Д. 251
Вольски С. 119
Воробьева Н.Н. 203
Воробьева Н.С. 269
Воронин А.А. 126
Воронин В.И. 146
Воронин И.В. 270
Воронкова В.И. 19
Воронцов Д.А. 65
Воротилов К.А. 30
Вуль А.Я. 355
Высоцкий В.В. 362

Г

Габбасов Р.Р. 214
Габдулхаков А.Г. 210, 230
Гавва В.А. 81, 408
Гавриков А.В. 396
Гаврилкин С.Ю. 325
Гаврилова С.И. 245
Гаврилюк А.Г. 35, 328
Гаврюшкин П.Н. 25
Гаджимагомедов С.Х. 330
Гадзаов А.Ф. 362
Гажулина А.П. 65
Газизова Ю.С. 229
Гайдорн У. 145
Гайдученко И.А. 261
Гайнанов Б.Р. 369
Гайнутдинов Р.В. 30
Галанин М.П. 27
Галафутник Л.Г. 111
Галиев Г.Б. 169, 189
Галин М.З. 354
Галочкина Т.В. 236
Галумян А.В. 178
Гамаюнов Е.Л. 202
Гамматаев С.Л. 100
Гапон И.В. 155
Гармашов С.И. 27, 66, 298
Геворгян А.А. 157, 419
Генералова А.Н. 312
Георгиев П.Г. 199
Георгобиани В.А. 420
Герасимова Н. 222
Герасимова Н.С. 241
Гервиц Н.Е. 380
Гертляйн Ф. 145
Гершанов В.Ю. 66, 298
Гибин А.М. 81, 408
Гилева А.М. 244
Гильдерман В.К. 369
Гиппиус А.А. 66, 171
Гиричева Н.И. 318
Гистер Г. 79
Гладков А.П. 165
Глазков В.П. 89, 138, 146, 155, 167, 285
Глухов Г.С. 232
Гнедовец А.Г. 382
Говор Л.И. 285
Гогин А.А. 140, 157, 186
Гойхман А.Ю. 70, 87, 431
Голаников А.Е. 172
Голобородский Б.Ю. 149
Головань Л.А. 167, 420
Головин А.В. 25
Головин И.С. 148
Головина Т.Г. 67, 67
Головко А.О. 158
Головкова Е.А. 326, 370
Голошумова А.А. 68
Голубев А.М. 105
Голубев Е.К. 370
Голубко Н.В. 359
Гончаренко А.В. 241
Гончаренко И.Н. 92
Гончаренко Ю.Д. 181
Гончарук С.А. 198
Горделий В.И. 248, 257, 433
Гордиенко В.М. 126
Гордиенко Е.В. 397
Горелова Л.А. 68
Горин К.В. 231, 233
Горкунов М.В. 418
Горлевский В.В. 186
Горобцов О.Ю. 120
Горшкова Ю.Е. 371
Горюнов Г.Е. 35
Горячева Е.А. 254
Гостев Ф.Е 227
Готлиб И.Ю. 373, 374
Готовцев П.М. 228, 231, 233, 354
Градова М.А. 399
Грановский А.Б. 360
Граф Ю. 192
Гребенев В.В. 36, 41, 44, 60, 91, 398, 400, 425
Грехов М.М. 61, 326, 331
Гречишкин Р.М. 82
Грешников Э.А. 281, 285, 285
Грибов П.А. 77
Григорьев С.В. 58, 181, 191
Григорьев Т.Е. 235, 355
Григорьев Ю.В. 154
Григорьева Л.Н. 365
Григорьева М.С. 60
Григорьева Т.Ф. 408
Гричук Е.С. 158, 174
Грищенко Ю.В. 74, 91, 343
Громов С.П. 310
Груздева А.М. 276
Грузинов А.Ю. 124, 215, 292
Грум-Гржимайло А.Н. 221, 254
Грызлова Е.В. 221, 254
Губанова Н.Н. 372
Гуда А.А 302, 381, 435
Гудим И.А. 50, 105, 405
Гук В.Г. 58
Гук С.В. 371
Гуларян С.К. 207
Гулина Л.Б. 422, 427
Гулова Г.К. 253
Гуляев П.Ю. 316
Гунчина О.Л. 279
Гурбанова О.А. 63
Гуреев А.И. 138
Гурецкий С.А 69
Гурская О.Г. 252
Гурьев В.В. 173, 332, 337
Гурьева П.В. 159, 291
Гусаковская А.А. 406
Гусаров В.В. 32
Гусач А.Ю. 248
Гусев А.О. 27
Гусейнов Д.Т. 317
Гущин А.В. 406

Д

Давыгора А.П. 69
Давыдюк А.В. 245
Дадинова Л.А. 203, 298
Данг Н.Т. 102
Данилевский А. 151
Данилкович А.В. 229
Дара О.М. 256
Даринская Е.В. 20
Дворцов И.А. 238
Девятериков Д.И. 149
Дегтерев А.А. 270
Дегтярева В.Ф. 28, 55
Дегтяренко А.Ю. 326
Дегтяренко П.Н. 325, 326, 332, 338
Дементьева М.М. 70
Демидюк И.В. 203, 238
Демин В.А. 13, 271, 360
Демина В.А. 259
Демина П.А. 233
Демина Т.В. 358

Демкив А.А. 148, 159, 283, 291
Депмайер В. 43
Дергоусова Н.И. 258
Дернович О.П. 69
Дерябин А.Н. 151
Деспотули А.Л. 20
Джанг Д.С.П. 372
Джафари А. 151
Дженг Дж.Й. 372
Джеффрис С.М. 158
Джигаев Д.А. 190
Джумъазода А. 399
Дзябченко А.В. 28
Дзядух С.М. 396
Диброва Д.В. 250
Дидейкин А.Т. 355
Диденко С.И. 108
Дидковский Н.А. 245, 252
Дикая О.А. 70
Димитрова О.В. 63
Дитрих Р. 339
Дмитриев А.К. 233, 240, 240
Дмитриева Т.В. 35, 380
Дмитриенко В.Е. 133, 180
Добров Е.Н. 172
Добровольская М.В. 280, 292
Долганов В.К. 71
Долганов П.В. 71, 419
Долгих В.А. 56
Долгих Д.А. 212, 218
Домашевская Э.П. 432
Доминский Д.И. 71, 316
Донцова О.А. 206, 217, 253
Дороватовский П.В. 160, 188, 280, 283, 285
Дорошкевич А.С. 185
Досовицкий А.Е. 397, 404
Досовицкий Г.А. 397, 404
Дрмеян Г.Р. 160
Дронов М.А. 367, 368, 368
Друбе В. 434
Друца В.Л. 158
Дубинин П.С. 147
Дубов Л.Ю. 148, 161
Дубова К.М. 234
Дубовенко Е.В. 406
Дугаев В.К. 119
Дудка А.П. 67, 72, 72, 73, 161, 162, 162, 163, 163
Дудникова В.Б. 73
Дунаев А.Г. 351, 372
Дутышев И.Н. 46
Дымшиц Ю.М. 31, 122, 186
Дьюшек М. 62
Дьяков А.В. 354
Дьякова Ю.А. 204, 230, 236, 247, 255
Дьяконова А.Н. 234, 257
Дьяченко С.В. 356
Дэвлет Е.Г. 280, 285
Дюбель М. 319
Дюков Ю.Л. 287
Дядькин В.А. 191

Е

Евдищенко Е.А. 67
Евдоков О.В. 142
Евстигнеева С.А. 399
Егиазарян А.М. 164
Егоров А.Н. 338
Егоров В.В. 29, 224
Егоров В.К. 164
Егоров Е.В. 164
Ездакова К.В. 360
Езубченко И.С. 74, 74, 91, 343
Еленич А.В. 250
Елисеев А.А. 420
Елисеев А.П. 68, 388
Елиференко К.Ю. 74
Елфимов Д.А. 125
Емелин А.В. 317
Емельченко Г.А. 93, 382, 421
Емельянов А.В. 81, 271, 408
Еремеев А.П. 75
Еремин Е.В. 405
Еремин Н.Н. 93, 299, 299
Еремина Т.А. 299, 299
Ермоченков И.М. 406
Ерохин В.В. 213
Ерхан Р.В. 185
Есаулков М.Н. 88
Есипов Р.С. 235, 262
Ефанов О.М. 120
Ефимов В.В. 75, 187
Ефимов С.В. 217
Ефимова А.И. 420
Ефимова Е.А. 75
Ефимова О.И. 271
Ефремов Р.Г. 204
Ефремова Е.П. 76

Ж

Жабоедов А.П. 37
Жаргалан Н. 362
Жариков Е.В. 73, 76, 363
Жарова М.А. 252
Желтиков А.М. 126, 275
Жерновой А.И. 356
Жигалина О.М. 30, 119, 186
Жигунов Д.М. 205
Житенев А.С. 285
Жолудев С.И. 408
Жохов А.А. 93, 382, 421
Жуйков В.А. 241
Жуланов В.В. 142
Жумагулов Я.В. 333, 334
Журавлев В.В. 153
Журавлева А.С. 90
Журенко С.В. 66
Жухлистова Н.Е. 235, 262

З

Забелин А.В. 124, 201
Забельский Д.В. 257
Заботнов С.В. 167, 420
Забродин А.В. 186
Завестовская И.Н. 420
Загорский Д.Л. 363
Загоскин Ю.Д. 235, 242
Загребельный О.А. 372
Задорожная Л.А. 31
Зайбт М. 121
Зайцев А.Н. 25
Зайцев Д.В. 345
Зайцева И.Е. 283
Зайцева Л.В. 284
Зайцева Н.В. 352, 375
Закалюкин Р.М. 354
Закирова Р.М. 364, 373
Закутайлов К.В. 104
Залесский А.Д. 227
Залога А.Н. 147
Залужный И.А. 124, 421
Замбург Е.Г. 404
Занавескин М.Л. 40, 74, 74, 88, 91, 174, 327, 343
Зарубина Е.С. 77
Захаров Б.А. 77, 190
Захаров Б.Г. 46
Захаров В.Н. 307
Зверева М.Э. 217, 253
Зверькова И.И. 382
Звягин А.В. 312
Зельбст Э.А. 78
Зенкевич А.В. 383, 432
Зленко Д.В. 236
Зозуля А.В. 124
Золотарев К.В. 142
Золотов Д.А. 122, 125, 144
Золотухин П.А. 315
Зорина Л.В. 45, 78
Зубавичус Я.В. 142, 156, 169, 239, 282, 289, 319, 332, 356, 369, 378, 384, 389
Зубкова Н.В. 41, 79
Зуев В.В. 380
Зуев Л.Б. 329
Зуйков И.А. 252
Зыкова М.П. 400
Зыонг Ч.Т.Т. 363

И

Иванов С.В. 348
Иванов А.В. 409
Иванов А.С. 326

Иванов В.Г. 328
Иванов В.К. 216
Иванов М.М. 373
Иванов Ю.В. 179
Иванова А.Г. 35, 123, 372
Иванова Е.С. 30, 75
Иванова О.С. 216
Ивановская Н.А. 84, 424
Иванов-Шиц А.К. 354, 373, 374
Иваньков А.И. 250
Иваньшина О.Ю. 154
Ивашина Т.В. 260
Ивашкина О.И. 269, 272, 273, 274, 275, 276, 276
Иващенко М.Н. 246
Ивлева Л.И. 33
Ивонин М.Н. 79
Игонин В.А. 157
Илатовский А.В. 224
Ильин А.С. 407
Ильин В.А. 120, 229, 396
Ильин О.И. 412
Ильина К.Б. 230, 236, 247
Ильина О.Н. 84
Ильина Т.С. 165
Ильичев А.В. 248
Илюшин А.С. 237, 300
Илюшин Г.Д. 80, 354
Имамов Р.М. 169
Ингачева А.С. 122, 144, 165
Иньшаков В.И. 397
Инюшкин А.В. 81, 407, 408
Иоффе А.И. 185
Иржак Д.В. 397
Иродова А.В. 92, 332, 335
Исаев Л.К. 168
Исаев-Иванов В.В. 224
Исаенко Л.И. 68
Исаенкова М.Г. 125, 181
Исаков А.И. 87
Исакова Н.Н. 166
Исмаилов А.М. 100, 398
Истратов А.В. 325
Итальянцев А.Г. 417
Ичалова Д.Е. 122
Ищенко А.А. 126, 311

К

Кабанов В.М. 408
Кавалла Р. 371
Кадочников В.В. 224
Казак А.В. 315
Казанова Г.В. 245
Казанцев М.С. 71
Каймиева О.С. 376
Калабухова А.В. 399
Калева Г.М. 359, 374
Калинин Ю.Е. 360
Калинина Е.В. 389
Калинина О.Ю. 256
Калистратова О.С. 406
Каллио Й. 217
Калоян А.А. 135, 280, 281, 284, 285, 292
Камеко Н.О. 205
Каменских И.А. 167, 205
Каминская Т.П. 167
Камышинский Р.А. 237, 239
Канаки А.В. 166
Канев И.Л. 249
Канева Е.В. 81
Каневский В.М. 37, 64, 151, 400
Каплунов И.А. 82, 82
Каптелинин С.Ю. 319
Капустин В. К. 387
Каратеев И.А. 83, 83, 119, 280, 325, 333, 337
Каратеева К.Г. 83, 83
Каргин Н.И. 326
Кардаш Т.Ю. 102
Каримов Д.Н. 84, 84, 85, 424, 425, 426
Карлова Д.А. 60
Карпинский Д.В. 75, 187
Карпихин А.Е. 112
Карпов В.М. 409
Карпов И.Д. 167
Карпов М.В. 234
Карпюк П.В. 397
Карцев П.Ф. 334
Касацкий П.С. 206, 224
Касьяненко Е.М. 198
Кауль А. 336
Кауль А.Р. 328
Каурова И.А. 33, 76, 85
Качалова Г.С. 199, 232, 241, 260
Кашаев А.А. 78
Кашаев Ф.В. 167
Кашкаров П.К. 205, 271, 285, 309, 309, 351, 407, 420
Кашурников В.А. 327, 333, 334, 336
Кваша М.С. 201
Кизима О.А. 179
Кириллов Б.Ф. 148
Кириллов С.В. 206
Кирилов А.С. 153
Кириченко В.Г. 355, 391
Кирпичников М.П. 212, 222, 241
Кирхгофа Л. 339
Кирюхина Г.В. 86
Киселев Д.А. 165, 399
Киселев О.И. 224
Киселева Т.Ю. 237, 408
Кисель В.Э. 69
Кислицын Ю.А. 238
Кичанов С.Е. 102, 286, 365, 369
Клевачев А.М. 411
Клементьев Е.С. 31, 44, 186
Клечковская В.В. 38
Климов Е.А. 189
Клинов Д.В. 229
Клопов Н.В. 224
Клочков А.Н. 189
Клочков В.В. 217
Клунникова Ю.В. 86
Клыков С.С. 186
Книжник А.А. 396
Князев Г.А. 148, 159, 168
Кобзев А.А. 237
Кобылянский Г.П. 181
Ковалев С.И. 31
Ковалева Л.К. 213, 245
Коваленко Е.С. 135, 281, 284, 285
Коваленко И.Б. 206, 257, 263
Коваленко О.В. 355
Ковальчук М.В. 11, 12, 13, 31, 122, 123, 126, 130, 137, 141, 173, 204, 216, 229, 230, 236, 247, 249, 249, 255, 271, 283, 285, 288, 351
Кодесс Б.Н. 166, 168, 239, 300, 315, 335, 375, 414
Кожевников С.В. 127
Кожемякин Г.Н. 409, 413
Козленко Д.П. 102, 286, 369
Козлов А.А. 87, 409
Козлова А.П. 414
Козлова Е.В. 186
Козлова И.Р. 129
Козлова Л.М. 246
Козлова Н.С. 414
Козловская К.А. 301
Козловский В.В. 389
Козловский В.Ф. 60
Козяр К.А. 104
Колбасов Б.Н. 389
Колдаева М.В. 20
Колесников А.И. 82
Колесников И.Е. 95
Колесников Н.Н. 318
Колесова И.М. 69
Коллинз С.П. 133
Колобылина Н.Н. 123, 281, 282, 283, 289, 290, 292
Коломийцев А.С. 128
Колосов В.Ю. 30, 32
Колотаев А.В. 320
Колташев В.В. 318

Колчин А.В. 420
Колымагин А.Б. 64, 400
Колыхалов И.В. 245
Колышкин Н.А. 169
Комлев В.С. 112, 345
Коммель И. 375
Коммель Л 375
Комова А.В. 239
Коморников В.А. 36, 44, 398
Кон В.Г. 128
Конарев П.В. 123, 172, 186, 203, 207, 236
Кондратьев О.А. 130, 169, 228, 283
Конев А.Ю. 224
Конева У.Ю. 87
Коневега А.Л. 206, 224
Коневцова О.В. 219
Коник П.И. 181
Конников С.Г. 24
Конов В.И. 401
Конова И.А. 231
Коноваленко С.И. 103
Коновалов А.Н. 233, 240, 240
Коновалов О.В. 216
Кононенко Т.В. 401
Кононова С.В. 38
Константинов В.Г. 71, 316
Константинов К.К. 67
Константинова А.Ф. 67, 67
Константинова Е.А. 309
Копаева М.Ю. 271, 365
Копица Г.П. 143, 360, 383
Копотков В.А. 78
Коптелов Э.А. 186
Корешкова А.Н. 409
Корженевский Д.А. 218, 227, 228, 261
Коржик М.В. 388, 397, 404
Корнеев В.Н. 124, 201
Коробейникова Е.Н. 107, 413
Коровин А.Н. 213
Коровин А.С. 355
Коровин С.А. 358
Коровушкин В.В. 365, 410
Королев Ю.М. 365
Королева А.Ф. 83
Короленкова М.В. 237
Коротков В.В. 363
Корсаков А.В. 25
Кортунов В.Н. 233, 240, 240
Корчагин Д.С. 334
Космына М.Б. 53
Косов А.В. 142
Косова Т.Б. 84
Костишин В.Г. 384, 399
Костров А.Н. 227
Костров С.В. 203, 238
Косушкин В.Г. 46
Котванова М.К. 316
Котельникова Е.Н. 87
Котлярова М.С. 241
Котова М.С. 367, 368, 368
Котова Н.М. 30
Коц И.Н. 128
Кочарян В.Р. 131, 132, 170, 170, 171, 178,178
Кочервинский В.В. 365, 384, 399
Кочнева М.В. 224
Кочуев Д.А. 111
Кравченко О.В. 215
Кравченко Э.А. 171
Кравчук Л.В. 138, 186
Крамаренко В.А. 31
Красавин А.В. 333, 334
Красилин А.А. 32
Красильников О.М. 174
Красильников П.М. 236
Краснов А.А. 108
Краснов М.П. 183, 192
Кржижановская М.Г. 56, 62, 68
Кривовичев С.В. 33, 68, 99, 391
Кривоногова Н.В. 258
Кривоногова П.Л. 246
Кривых А.В. 335
Крисько О.В. 187
Кричевцов Б.Б. 352, 375
Кротова Л.И. 351, 372
Круглов В. 339
Круглов В.В. 153
Круглов В.С. 325, 332, 332, 337, 338
Крупянский Ю.Ф. 207, 221,254
Крылов В.Е. 338
Крылов П.Н. 373
Крылова Т.С. 88, 327
Крымская О.А. 181
Крынский С.А. 245, 252
Крышкин В.И. 397
Крюкова А.Е. 123, 172, 236
Крюкова Е.А. 218
Крюкова М.В. 232, 241, 260
Крючкова Л.Ю. 57, 88
Ксенофонтов А.Л. 172
Кубасов И.В. 104
Кудрявцев И.К. 49
Кудряшова К.С. 232, 241
Кузнецов В.В. 410
Кузнецов Н.М. 242
Кузнецов Н.Т. 171
Кузнецов П.А. 348
Кузнецов С.П. 186
Кузнецова Д.Е. 397
Кузнецова Ю.О. 208
Кузьмин В.И. 362
Кузьмин М.П. 90
Кузьмина Л.Г. 310
Кузьмина М.А. 49, 95, 208
Кузьмичева Г.М. 33, 76, 85, 97, 233, 361
Куклин А.И. 224, 236, 257
Кулатов Э.Т. 49
Кулебякина А.И. 242
Кулешов Н.В. 69
Куликов А.Г. 130, 137, 152, 173
Куликов И.В. 88, 327
Куликов С.А. 153
Кулипанов Г.Н. 142, 201
Кульков А.М. 89
Кульницкий Б.А. 359
Кульчин Ю.Н. 209
Кумсков А.С. 154
Куницына Т.А. 272
Купер К.Э. 436
Куранова И.П. 34, 203, 209, 235, 238, 255, 259, 262
Курилкин В.В. 378
Курилова С.А. 203
Курильчик С.В. 69
Курочкина Л.П. 188
Курта Р.П. 120, 124
Кутровская С.В. 325
Кутузов Д.С. 82
Кучерик А.О. 325
Кучин А.Г. 146
Кютт Р.Н. 129

Л

Лаврентьев М.Г. 361
Лавров С.Д. 36
Лазарев В.В. 310, 313, 418
Лазарев С.В. 421
Лакунина В.А. 256
Ламзин В.С. 210, 217
Ланина Н.Ф. 124, 201
Лапкин Д.А. 213, 271
Лаптинская Т.В. 55
Лапушкин Ю.А. 186
Ларин В.С. 399, 410
Латушкин С.Т. 325
Латышев А.В. 34
Латышева Е. 360
Лашков А.А. 210, 230
Лебедев А.А. 389
Лебедев А.И. 60
Лебедев А.М. 108, 145, 150, 167, 205, 344, 389, 390
Лебедев В.Т. 387
Лебедев Д.В. 224
Лебедев Л.А. 378
Лебедев Л.Г. 383
Лебедева И.В. 177
Лебедев-Степанов П.В. 355, 418, 424
Лебединский Ю.Ю. 432

Леванов В.А. 360
Левин Э.Е. 102
Левина А.А. 376
Левчановский Ф.В. 153
Леготин С.А. 108
Леконцева Н. В. 215
Леонов В.П. 129
Лепешкин С.В. 49
Лепешов Г.Г. 179
Лесина И.Г. 186
Летко А.К. 376
Ли Л.Е. 35
Ли С. 336
Ли Ю.В. 329
Лигачева Е.А. 154
Лизунов А.В. 186
Лильина А.В. 243
Липкин А.В. 241, 260, 261
Липко И.А. 211
Липко С.В. 47, 211
Лис Д.А. 76
Лисицын С.А. 128
Лисовенко Д.С. 84
Литвин В.С. 89, 186
Литвиненко Е.И. 153
Лихачев И.А. 134, 173, 332, 383
Лобанов Н.Н. 90, 130
Лобинский А.А. 411
Лобода А.Ю. 281, 282, 289, 290
Лойко Н. Г. 207
Ломонов В.А. 405
Ломтев Л.А. 42
Лопатина Ю.А. 410
Лоренц Х. 87
Лорман В.Л. 219
Лосев Е.А. 190
Лотин А.А. 90, 95, 96, 99
Лощенов В.Б. 208, 212
Лугинина А.П. 248
Луговской А.В. 174
Лукин Е.В. 102, 369
Лукина Е.А. 344
Лунев А.В. 325, 333
Лунин В.Ю. 211, 221, 243, 254
Лунина Н.А. 238
Лунина Н.Л. 221, 243, 254
Лупоносов Ю.Н. 71
Лыкова И.С. 79
Лысова Е.Ю. 244
Любимов В.Н. 23
Любителев А.В. 241
Любутин И.С. 35, 50, 105, 328, 363, 367, 380
Люкманова Е.Н. 212
Лякаев Д.В. 109
Лясникова М.С. 31, 41, 55, 91
Ляхова М.Б. 82
Лященко А.К. 76

М

Маврицкий О.Б. 338
Мажорова О.С. 27
Мазо Г.Н. 354
Майборода И.О. 74, 74, 91, 174, 343
Майоров М.И. 237
Макаров А.А. 256
Макаров В.В. 249
Макаров В.И. 212
Макаров М.А. 13
Макаров Н.А. 283, 285
Макарова И.П. 36, 44, 398
Макарова Л.А. 90
Макарова О.Л. 92
Максимова А.Н. 327, 336
Максимова Е.В. 206
Максимова К.Ю. 70, 87, 431
Малахова Ю.М. 271
Малахова Ю.Н. 213, 244
Малашенкова И.К. 245, 252, 261
Малеев А.В. 111, 157
Малинина Е.А. 171
Малинкович М.Д. 165, 399
Малышев А.А. 283
Малюков С.П. 86
Мамичев Д.А. 40
Мамонтова С.Г. 92, 94
Манджиева Ю.Б. 251
Маннанов А.А. 316
Маноменова В.Л. 12, 93, 103
Маношин С.А. 119, 185
Манцызов А.Б. 217
Маньоли Э. 43
Марданов А.В. 199
Маренкин С.Ф. 90, 95, 108
Марин В.Н. 186
Маринский Г.С. 201
Марквичева Е.А. 244
Маркина Ж.В. 202
Марков Г.П. 408
Мартусевич А.А. 245
Мартусевич А.К. 213, 245, 246, 246
Мартынов В.И. 254
Мартышов М.Н. 407
Маругин А.М. 49
Марченко Е.И. 93
Марченко И.В. 201, 214, 237, 247
Марченков Н.В. 130, 152, 173, 175
Марченкова М.А. 204, 230, 236, 247, 255, 315
Марычев М.О. 65
Масалов В.М. 93, 382, 421
Маслов М.К. 421
Матвеев Ю.А. 432
Матвейчикова П.В. 356
Матвиенко А.А. 77
Матевосян К.Р. 320
Матосян А.А. 178
Матросов В.Н. 377
Махаева Е.Е. 251
Махиборода А.В. 248
Медведев А.Г. 50
Медведев П.Н. 345
Медведева С.С. 70
Медведская П.Н. 87
Медникова М.Б. 283
Мелик-Шахназаров В.А. 175
Мельникова А.А. 239
Мен Г. 79
Менушенков А.П. 124, 328, 356, 369, 378, 433
Меньшиков К.А. 108, 145, 176, 176, 344, 389, 390
Меньшов В.Н. 357
Мехрабова М.А. 180
Мечинский В.А. 397
Мешков И.В. 186
Милль Б.В. 67, 180
Минаев Н.В. 357
Минаев Р.В. 150
Минаева О.А. 150
Минаева С.А. 351
Мингажева З.В. 365, 384
Минеев К.С. 198
Минеев Н. 336
Минеев Н.А. 331, 337, 338
Минина Е.О. 284, 289
Минкин А.С. 177, 396
Миньо Ж.М. 31
Мирзаде Ф.Х. 346
Мирон Н.Ф. 166, 167
Миронов А.В. 345, 372
Миронов В.С. 78
Миронов Е.П. 214
Миронова Г.М. 153
Миронова К.Е. 312
Миронова О.А. 372
Миронова-Ульман Н. 107
Мирошин С.В. 365
Митрофанов А.В. 126
Митькевич В.А. 256
Михаельзен К. 145, 192
Михайлина А.О. 215
Михайлов А.А. 50
Михайлов А.М. 210, 230
Михайлов В.И. 411
Михайлов М.А. 92, 94
Михайлов Р.В. 317
Михайлова М.С. 241
Михалевский В.А. 90, 95, 96, 99
Михлин А.Л. 397
Михуткин А.А. 131, 182, 237
Мишин А.В. 248, 433

Мишина Е.Д. 36, 303
Мишина М.Ю. 249
Мищенко И.Н. 214
Мкртчян А.Г. 131, 132, 178, 178
Мкртчян А.Р. 132, 177, 178, 178, 419
Мовсисян А.Е. 132, 170
Модин Е.Б. 132
Моисеенко А. 222
Молоденский Д.С. 140, 188, 215
Молодцов С.Л. 431
Молодцова К.А. 49
Молодык А. 336
Молчанов С.П. 355
Моргунов Р.Б. 78
Мордкович В.З. 359
Мороз А.Н. 336
Мороз Э.М. 133
Морозов В.Н. 249
Морозов И.А. 186
Морозов И.В. 383
Морозов О.В. 338
Морченко А.Т. 365, 384, 399, 410
Москвин Е.В. 181
Мосунов А.В. 359, 374
Мохов Е.Н. 81, 408
Музафаров А.М. 244
Мульд С.А. 290
Муравьева Т.И. 235, 262
Мурадян Т.Р 171
Мурашев М.М. 285
Мурашкевич С.М. 153
Мурашкина А.А. 317
Мурин И.В. 373, 374
Муслимов А.Э. 37, 119, 151
Мустафаева С.Н. 317
Мухамеджанов Е.Х. 137
Мухамеджанов Э.Х. 122, 133, 186
Мясников А.Г. 206
Мясникова А.Э. 43

Н

Набатов Б.В. 67
Навасардян М.А. 50
Нагашима К. 65
Нагорная Т.В. 179
Нагорный А.В. 155, 179, 250
Надеждин К.Д. 198
Надточенко В.А. 227
Назаров А.М. 180
Назаров И.Б. 224
Назаров М.М. 126
Назарова Т.И. 203
Назин В.Г. 145
Назьмов В.П. 142
Намсараев З.Б. 239
Напольский К.С. 102
Нарожная О.Е. 361
Наумов Д.Ю. 68
Нгуен Куок Ши 284
Небера А.Л. 186
Недолужко А.В. 272
Немчинова М.С. 215
Неов Д. 153
Непомнящих А.И. 37, 358
Несмелов С.Н. 396
Нечаев А.В. 312
Нечаева Е.Н. 239, 300
Неъматов М.Г. 399
Низьев В.Г. 346
Никитин А.Н. 346
Никитин О.Р. 42
Никифорова Ю.А. 35
Никогосян В.Ц. 178
Николаев А.М. 95
Николаев Д.П. 144
Николаев М.Ю. 257
Николаев С.Н. 360, 383
Николаев Ю.А. 207
Николаева А.Ю. 40, 199, 199, 218, 227, 228, 250, 261
Николаева В.М. 234
Николайчик В.И. 400, 412
Никонова Е.Ю. 215
Никулин А.Д. 215
Нисбет Г. 133
Новакова А.А. 237, 251, 408
Новиков Г.В. 220, 220
Новиков Д.В. 133, 434
Новиков М.А. 403
Новикова В.В. 179
Новикова Н.Е. 72, 103
Новикова Н.Н. 136, 216, 249
Новодворский О.А. 90, 95, 96, 99
Новоселецкий В. Н. 232, 251
Новоселова Е.Г. 159
Новотоцкая-Власова К.А. 218
Ноговицына Т.А. 97
Норе Н. 239
Носик В.Л. 252
Нуждин А.Д. 119, 202
Нуждин Д.С. 60
Нуриев И.Р. 180

О

Оболенская Л.Н. 97
Овезова А.А. 253
Овсянников Д.А. 359
Овчаров А.В. 326, 332, 332, 337
Овчинникова Е.Н. 133, 180, 301
Оганов А.Р. 38
Огурцов Д.П. 245, 252
Одинцов Д.С. 327
Омельченко А.И. 198, 221, 316
Онуфриев А.В. 224
Онущенко А.А 98
Онущенко П.А. 98, 372
Ополченцев А.М. 64, 400, 253
Орехов А.С. 38, 249
Орехов Ф.С. 216
Орешко А.П. 133, 180, 300
Орлов В.Г. 98
Орлов Ю.Д. 82
Орлова Е.И. 19
Орлова Т.Ю. 202
Орловский Ю.В. 308
Осипов А.В. 325
Осипов Е.М. 243, 258
Осипов М. 336
Осипов М.А. 328, 331, 337
Остерман И.А. 206
Островский Б.И. 39, 124
Осыченко А.А. 227
Охотников К.С. 66
Охрименко И.С. 248
Охрименко Т.М. 76

П

Павликов А.В. 167
Павлов К.А. 181
Павлюк М.Д. 64, 400
Паклин А.С. 358
Палачева В.В. 148
Палто С.П. 310, 313, 418
Палчаев Д.К. 330
Паникоровский Т.Л. 391
Панина Л.В. 384, 399, 410
Панкова Ю.А. 99
Пантюшов В.В. 321
Панченко В.П. 361
Панченко В.Я. 95, 96, 126, 214, 312
Папков В.С. 200
Папушина Т.И. 58
Папушкин И.В. 120, 371
Парахонский Б.В. 237
Паращенко А.Н. 409
Паращук Д.Ю. 71, 316
Парфенов О.Е. 83
Пархоменко Ю.Н. 104
Паршина Л.С. 90, 95, 96, 99
Пасешниченко К.А. 307
Пахарукова В.П. 143
Пахневич А.В. 284
Пахомов А.А. 254
Пахунов А.С. 280, 285
Пашаев Е.М. 332
Пашаев Э.М 134, 173, 383
Пашаян С.Т. 134
Пашинин В.П. 401
Пеков И.В. 41, 51, 79
Пережогин И.А. 359
Перлович Ю.А. 125, 181
Перов Н.С. 90
Перов С.Н. 129
Перунов И.В. 363

Перфилов С.А. 359
Пестриков П.П. 102
Петерс Г.С. 124, 215, 292
Петренко В.И. 54, 155, 250
Петржик Е.А. 20, 30, 75
Петров А.В. 373, 374
Петров С.Н. 348
Петрова В.А. 38
Петрова О.А. 217, 253
Петрова С.А. 376
Петрова Т.Е. 221, 243, 254
Петровская Л.Е. 218
Петрунин В.Ф. 358
Петрушанко И.Ю. 256
Петрыкин В. 336
Петухов Б.В. 39
Петухов М.В. 207
Петухова Т.Б. 153
Печникова Е.В. 249, 229
Пикин С.А. 100
Пикуз С.А. 186
Писаревский Ю.В. 130, 141, 154, 173, 183, 192, 204, 230, 236, 255, 405
Пичкур Е.Б. 182, 370
Платонов С.П. 146
Плесовских А.И. 85
Плетнев В.З. 218, 254
Плетнева Н.В. 218, 254
Плотников В.Г. 311
Плотников В.С. 132
Плотниченко В.Г. 318
Повзнер А.А. 63, 97
Поволоцкий А.П. 111
Подбельский В.В. 85
Подгорский В.В. 229
Подобин А.А 248
Подпрятов С.Е. 201
Подпрятов С.С. 201
Подсыпанина Н.С. 378
Подурец К.М. 135, 280, 281, 284, 285, 285, 292
Подшивалов Д.Д. 255, 255
Пожидаев В.М. 289, 290
Покровский С. 336
Покровский С.В. 331, 337, 338
Полесскова Е.В. 206, 224
Поликанов Ю.В. 206
Поликарпов М.А. 126, 214
Поликарпов М.В. 135
Политова Е.Д. 359, 374
Полуэктов Ю.М. 256
Польшаков В.И. 217
Поляк Л.Е. 411
Поляков В.В. 400
Поляков К.М. 160, 223
Полякова В.В. 400
Поминова Д.В. 212
Пономарев Д.А. 149
Пономарева Е.В. 245
Пономаренко С.А. 41, 71, 316
Попик А.Ю 202
Попинако А.В. 260
Поплавной А.С. 40
Попов А. 207
Попов А.М. 40, 177
Попов А.Н. 232, 260
Попов В.В. 169, 356, 369, 378
Попов В.К. 345, 347, 351, 372
Попов В.О. 14, 199, 199, 207, 218, 223, 243, 258
Попов М.Ю. 359
Попов П.А. 84
Попова Н. А. 363
Постников В.А. 41, 91
Постнова И.В. 202
Потапкин Б.В. 396
Поташев С.И. 186
Потехин К.А. 157
Почечуев М.С. 275
Преснов Д.Е. 420
Пресняков М.Ю. 91, 123, 182, 189, 239, 261, 360, 379
Пресняков Р.В. 37
Привезенцев В.В. 184, 318
Приходченко П.В. 50
Приходько А.С. 121
Приходько В.И. 153
Приходько К.Е. 70
Приходько Ю.В. 27
Прокопович П.П. 431
Прокофьев И.И. 210, 230
Прокошев В.Г. 111
Пронин И.И. 431
Просеков П.А. 130, 141, 154, 169, 183, 192, 204, 230, 405
Простомолотов А.И. 25, 26, 61
Прохоров Д.В. 52
Прохоров И.А. 107, 151, 182
Проценко А.И. 183
Прошунин Н.Н. 27
Прудникова З.И. 246
Прун В.Е. 144
Прусаков К.А. 229
Прууэл Э.Р. 142
Пруцков Г.В. 134
Прядченко В.В. 319
Пташник А.В. 129
Пудовкина Г.И. 379
Пузынин И.В. 184
Пузынина Т.П. 184
Пустовалов Е.В. 132
Пушкарев С.С. 169, 189, 331
Пущаровский Д.Ю. 41, 79
Пшеничников М.С. 316

Р

Раабе Я. 434
Рабаданов К.Ш. 366
Рабаданов М.Р. 100
Рабаданов М.Х. 100, 330, 366, 398
Рабинович О.И. 108
Равин Н.В. 199
Раевская С.И. 384
Раевский И.П. 384
Разуваева Е.В. 242
Ракитина Т.В. 227, 228, 250, 258, 261
Ральченко В.Г. 182, 401, 407
Расторгуев В.А. 285
Расцветаева Р.К. 51, 77, 101, 101, 103
Рау В.Г. 42
Рау Т.Ф. 42
Рау Э.И. 184
Ращенко С.В. 25
Ревазов В.В. 338
Ревина А.А. 362
Реджепова А.С. 253
Рейхард Л.Е. 256
Репченко Ю.Л. 136
Ретивов В.М. 289, 397
Решетников С.М. 364
Решетова И.К. 292
Ривкина Е.М. 218
Рижиков Ю.Л. 257
Ризниченко Г.Ю. 206, 234, 257
Рил А.И. 108
Рихвицкий С.В. 119
Рихтер К. 133
Рогалев А. 180
Рогачев А.В. 136, 136, 213, 216, 249, 315, 433
Рогожин Е.А. 231
Родина Е.В. 203, 217, 253
Рождественская И.В. 43
Розе М. 190
Розенберг К.А. 101
Романов А.Е. 431
Романов Д.А. 182
Романов Р.И. 382
Ромашев Л.Н. 149
Росляков И.В. 102
Рочева В.В. 312
Рошаль С.Б. 219
Рошаль Д.С. 43
Рощин Б.С. 119, 122, 151, 186, 202
Рощина М.А. 272, 274, 275, 276
Рощупкин Д.В. 397

Рубин А.Б. 206, 234, 257
Рубинский С.В. 185
Рубцов Э.Р. 410
Рудакова Е.Б. 252
Руднев И. 336
Руднев И. А. 327, 328, 331, 336, 337, 338
Руднева Е.Б. 12, 64, 93, 103
Рудык Н.Н. 412
Румянцев И.Д. 30
Румянцева О.С. 286
Русаков А.В 208
Руткаускас А.В. 102
Рутт А. 339
Руффер Р. 149
Рыбаков В.Б. 33, 76
Рыбалтовский А.О. 311, 357, 401
Рыльков В.В. 360, 383
Рычков Г.Н. 224
Рычков Д.А. 190
Рябов Е.А. 126
Рябова А.В. 212, 308
Рязанов А.И. 325, 333

С

Савельев С.О. 57, 88
Савенко Б.Н. 102, 369
Савинкина Е.В. 97
Савинский С.С. 22
Савчук Г.К. 376
Садилов В.В. 185
Садовников К.С. 222
Садовская Н.В. 374
Садовский А.П. 314, 319, 406
Садыгов Р.М. 180
Садыков Р.А. 89, 137, 138, 186
Сазаки Г. 65
Саидов Х.М. 273
Саламатов М.С. 373
Салем М.М. 410
Самбуева С.Р. 335
Самойленков С. 336
Самойлова Н.Ю. 23, 154
Самыгина В.Р. 34, 219, 234, 238, 434
Сапегина А.В. 77, 103
Саплинов Е.Ю. 258
Сапожников А.Н. 37, 81, 358
Сапожников Ф.В. 256
Сапрыкина И.А. 286
Сарайкин В.В. 61
Саркар Н.Р. 387
Сархадов И. 387
Сарычева М.Е. 320
Сасновская В.Д. 78
Сафронов В.В. 46, 258
Сафронов Н.А. 275
Сбитнева С.В. 344
Сварник О.Е. 273
Свергун Д.И. 203, 207
Светогоров Р.Д. 239, 332, 378
Свечников Н.Ю. 108, 145, 344, 389, 390
Свинарев Ф.Б. 352, 375
Свиридов А.П. 226, 311
Свистунова О. 339
Свистунова О.И. 338
Свистушкин В.М. 221
Седов А.С. 275
Седов В.С. 401
Седуш Н.Г. 259
Селезнева Е.В. 36, 44, 398
Селезнева Н.Д. 245
Селютин А.Г. 436
Семенов А.А. 186
Семенов Е.В. 325
Семчишен В.А. 312, 313
Семыкин Ю.А. 292
Сенатулин Б.Р. 104
Сенин Р.А. 120, 157, 186, 231
Сенина В.А. 35
Сергеев Г.С. 98
Сергеев И. 151
Сергеева О.Н. 165
Сергеева Я.Э. 231, 233
Сергиев П.В. 206
Серебренников Д.А. 44
Серегин А.В. 186
Серегин А.Ю. 137, 169
Середин Б.М. 410
Сереткин Ю.В. 25
Серобян Г.А. 227
Серов В.Л. 186
Сесилия А. 151
Сеченых П.А. 52
Сивожелезов В.С. 220, 220
Сигов А.С. 36, 303
Сидоркин С.Ф. 186
Сидоров В.С. 107, 413
Сидоров-Бирюков Д.А. 126, 275
Сидоров-Бирюков Д.Д. 259
Сизова Н.Л. 84, 103
Сизова Т.Ю. 358
Сиколенко В.В. 187
Силонов В.М. 187
Симановская А.А. 232, 260
Симдянкин И.В. 422
Симонов А.А. 138
Симонов С.В. 45, 78
Синицын Д.О. 207, 221, 254
Сипливый В.И. 198
Сирота М.А. 381
Сиротин А.П. 153
Сиротинкин В.П. 112
Сирунян А.М. 178
Ситников А.В. 360
Скворцов В.В. 397
Скворцова Н.П. 104
Скоробогатова Т.В. 187
Скрылева Е.А. 104
Слободский Т. 119
Случинская И.А. 60
Смагунов Н.В. 47
Смекалова Т.Н. 287, 290
Смирнов В.А. 311, 400
Смирнов Г.В. 149
Смирнов И.В. 345
Смирнов И.С. 159
Смирнова А.И. 315, 318
Смирнова Е.С. 50, 72, 105, 163
Смирнова И.А. 139, 187
Смоленцев Г.Ю. 435
Смоленцев Н.Ю. 381
Смыслов Р.Ю. 360
Снигирев А.А. 135
Снигирева И.И. 135
Соболев Б.П 84, 84, 85, 105, 106, 106, 400, 412, 413, 424, 425, 426
Соболев Д.А. 267
Соболевский Н.М. 186
Соболь Э.Н. 198, 221, 222, 226
Совык Д.Н. 401
Созонтов Е.А. 182, 281, 288, 291, 292
Соколов А.В. 219
Соколов А.Е. 143
Соколов А.С. 272
Соколов В.В. 144
Соколов В.И. 312, 320
Соколов И.С. 274
Соколова О.С. 188, 207, 222, 232, 249, 251, 260
Сокольников Р.И. 91
Солдатов А.В. 302, 381, 435
Солдатов М.А. 302, 435
Солдатова К.М. 318
Соловьев А.А. 380
Соловьев А.В. 249
Солопан С.А. 250
Солянкин П.М. 88
Соменков А.В. 353
Соменков В.А. 138, 167, 389
Сомов Н.В. 45, 54, 364, 406
Сорокин А.И. 361
Сорокин Д.Ю. 223
Сорокин И.И. 229
Сорокин Н.И. 85, 105, 106, 106, 400, 412, 413, 424, 425, 425, 426, 426
Сорокина Н.И. 19, 41, 60, 91
Софиянчук Д.В. 175
Сошникова Ю.М. 221, 222
Спасенных М.Ю. 182

Срабионян В.В. 319
Стадничук И.Н. 236
Станишнева-Коновалова Т.Б.188
Станкевич В.Г. 108, 145, 150, 344, 389, 390
Старикова Н.В. 237
Старицын М.В. 348
Старосельский И.А. 124, 215
Старчиков С.С. 35, 367, 380
Сташенко В.В. 381
Степанов А.А. 403
Степанов А.С. 207, 221, 254
Степанов С.В. 161
Степанова Е.В. 312
Степанова Т.С. 261
Степина Н.Д. 216
Стефанович С.Ю 53, 359
Стеханова Т.Н. 199
Столярова Д.Ю. 381
Сторчак В.Г. 83, 83
Стрелов В.И. 46, 46, 107, 175, 258, 413
Стрельцов Д.Р. 242
Стремоухов С.Ю. 139
Стрижов Н.И. 234
Студитский В.М. 222, 241
Субботин И.А. 134
Субботин К.А. 76
Суворов Э.В. 139, 187
Суворова Е.И. 140
Суворова О.В. 362
Сулейманов Е.В. 109
Сульянов С.Н. 140, 188, 330, 363
Сульянова Е.А. 84, 424, 425
Сумин В.В 167
Сумников С.В. 107, 154
Сундеев Р.В. 156
Суплатов Д.А. 199
Сурнин В.И. 27
Суханов Л.П 344, 108, 389, 390
Суханова Е.А. 319
Сухарев В.А. 319
Сухарева И.П. 374
Сухарина Г.Б. 381
Сухинина Н.С. 382, 421
Сучков Д.О. 412
Сыров Ю.В. 52, 69
Сырчина М.С. 227
Сычев М.М. 356, 378
Сычугов В.В. 332

Т

Таланин В.И. 47
Таланин И.Е. 47
Таланов В.М. 108, 293
Таланов М.В. 108, 293
Таланцев А.Д. 78
Талденков А.Н. 81, 83, 407, 408
Талызина А.А. 261
Тарасова А.Ю. 68
Таратин Н.В. 87
Таргонский А.В. 141, 154, 173, 183, 192
Татаринцев А.А. 184
Татаринцев М.К. 274
Таусон В.Л. 47, 211
Тафеенко В.А. 48, 71, 316
Темеров В.Л. 405
Тен К.А. 142
Теплов А.А. 370
Терехов В.А. 432
Терешкина К.Б. 207, 221, 254
Терещенко А.Н. 318
Терещенко Е.Ю. 247, 281, 282, 283, 285, 289, 290, 315
Теслюк А.Б. 120
Тимаева О.И. 361
Тимашев П.С. 311, 343, 347, 352, 379, 401
Тимофеев А.А. 338
Тимофеев В.И. 34, 235, 255, 255, 259, 261, 262
Титаев Д.Н. 109
Титаева Е.К. 65
Титов А.А. 227
Тифлова О.А. 223
Тихомиров С.А. 228
Тихонов А.М. 202, 262
Тихонов В.И. 387
Тихонова Т.В. 223, 243, 258
Тихонова Т.Н. 215
Тищенко С.В. 215
Ткаченко А.А. 360
Тойкулиев Т.Г. 253
Токмачев А.М. 83, 83
Толбанов О.П. 402
Толочко Б.П. 142
Толстихина А.Л. 30
Толстой В.П. 411, 422, 427
Томчук А.В. 155, 197
Топали Р. 119
Торопова К.А. 269, 272, 273, 274, 275
Трегубенко А.А. 175
Тренинков И.А. 344, 345
Третьяков С.А. 82
Тригуб А.Л. 142, 314
Трифонов А.А. 286
Тропин Т.В. 362
Троян И.А. 35, 328
Троянчук И.О. 75, 187
Трунов Д.Н. 89, 138, 186
Трунькин И.Н. 189, 189, 239
Трухан В.М. 95
Труханов В.А. 410
Труханова Е.Л. 69
Трушина Д.Б. 201
Тугушев В.В. 357, 360, 383
Тулубенский М.Г. 285
Турищев С.Ю. 432
Туровцев В.В. 82
Тухлиев З.К. 184, 387
Тытик Д.Л. 362
Тютюнников С.А. 187
Тютюнников С.И. 75, 148

У

Удовиченко И.П. 229
Улитин Е.О. 171
Ульянов В.А. 155, 186, 233, 240, 240
Уманский Б.А. 422
Унежев В.Н. 325
Урюпова В.В. 246
Усачев Д.Ю. 435
Усольцева Н.В. 315, 318
Усоскин А. 339
Успенский Ю.А. 49
Устинов В.В. 149
Уханова Е.В. 288, 291, 292
Ушаков В.Л. 268, 275

Ф

Файков П.П. 363
Фараджов Н.В. 180
Фарзалиев С.С. 180
Фаррахова Д.С. 208
Федоров А.А. 397, 404
Федоров А.Ю. 190
Федоров В.А. 206, 257, 263
Федоров Г.Е. 261
Федорова А.А. 383
Федорова Н.В. 172
Федорова Н.Ф. 158
Федорова Я.Б. 245
Федорченко И.В. 90, 108
Федотов А.А. 412
Федотов А.Б. 275
Федотов А.Ю. 112, 314, 345
Федотов И.В. 275
Федотова И.В. 373
Фейгин Л.А. 48, 146
Феофанов А.В. 241
Фесенко В.А. 181
Фещенко А.В. 186
Филанович А.Н. 97
Филатов С.К. 56, 57, 62, 111
Филоненко В.П. 353
Филонова Е.В. 344, 345
Флюкегер Р. 325
Фокина Н.С. 49
Фоломешкин М.С. 154
Фоминский В.Ю. 380
Фоминский Д.В. 382
Фомичева Л.Н. 92
Фортальнова Е.А. 359

Форш П.А. 309, 407
Франк-Каменецкая О.В. 49, 95, 208
Фролов Д.Д. 383
Фролов К.В. 50, 105, 302, 363
Фукин Г.К. 109
Фукина Д.Г. 109
Фундаменский В.С. 78
Фурукава Ё. 65

Х
Хайдуков Е.В. 312, 313
Хайдуков К.В. 313, 320
Хайлов Н.А. 245, 252, 261
Хайтлина С.Ю. 203
Хамова Т.В. 49, 143, 356
Ханин Д.А. 286
Хансен В. 119
Харитонова Е.П. 19
Хартвиг Ю. 151
Хасанов Р.Ю. 274
Хасанов С.С. 45
Хачатрян Д.С. 320
Хеинц М. 319
Херманн Р.П. 151
Хесслер А. 339
Хмеленин Д.А. 119
Хмеленин Д.Н. 30, 186, 363
Хоменко М.Д. 270, 346
Хомич А.А. 182
Хорт А.М. 52
Хорьков К.С. 111, 325
Хофакер Ф. 339
Хоченков Д.А. 312
Храмова О.Д. 90, 95, 96, 99
Хрипунов А.К. 360
Христов И.Г. 184
Христова Р.Д. 184
Хрущев С.С. 206, 234, 257, 263
Хрыкина О.Н. 73
Хуббутдинов Р.М. 378
Худоба Д. 179
Худорожков А.А. 190
Хышов А.А. 403

Ц
Цаллагов С.И. 223, 258
Цанк М. 43
Царенко Н.А. 356
Цвигун Н.В. 383
Цвященко А.В. 58, 92
Церетели Э.К. 253
Цетлин М.Б. 145, 370
Цыбуля С.В. 143, 193
Цыганкова С.В. 272
Цымбаленко В.Л. 50

Ч
Чарушникова Д. 289
Чаусов Ф.Ф. 364
Чвалун С.Н. 14, 200, 213, 242, 244, 259, 355, 370, 381
Челибанов В.П. 49
Чен Г. 384
Чен Е.Ю. 372
Чепиков В. 336
Чепиков В.Н. 328
Черебыло Е.А. 90, 95, 96, 99
Черезов В.Г. 248, 433
Черепанов В.М. 214
Черная Т.С. 110
Черниговская Т.В. 15
Черноглазов К.Ю 383, 360
Черных А.Г. 414
Черных И.А. 88, 327, 343
Черных М.Я. 327
Чернышев Б.В. 46
Чернышев В.В. 144
Чернышов А.А. 142, 156
Чертков О.В. 241
Чесноков Ю.М. 110, 237, 332, 383
Чистякова М.В. 288
Чихачева И.П. 361
Чичков Б.Н. 312
Чкалов Р.В. 111
Чубова Н.М. 191
Чудинова Ю.В. 241
Чуев М.А. 214
Чукавин А.И. 314
Чукалина М.В. 122, 144, 165
Чуканов Н.В. 51, 77, 79, 101
Чуличков А.Л. 207
Чулков Е.В. 357
Чумаков А. 151
Чумаков Н.К. 81, 408
Чумаков Р.Г. 108, 145, 167, 205, 344
Чумаков. А.И. 149
Чумляков Ю.И. 414
Чупрунов Е.В. 45, 54, 406
Чураков А.В. 50, 153
Чурбанов С.Н. 347, 379
Чурюканова М.Н. 399, 410
Чуховский Ф.Н. 125, 152

Ш
Шаблинский А.П. 111
Шавкин С.В. 173, 325, 326, 329, 332, 332, 337, 338
Шайтан А.К. 197
Шайтан К.В. 207, 216, 220, 220, 224, 241, 251, 436
Шакирзянов Р.И. 365, 384
Шалаев А.А. 358
Шалдин Ю.В. 425
Шалимова А.В. 156
Шаляпин В.Н. 148
Шамрай В.Ф. 112
Шапиев И.М. 398
Шапиро А.Я. 35
Шараев М.Г. 268
Шарапов А.С. 378
Шарипов В.Р. 409
Шарипов З.А. 184, 387
Шарков М.Д. 24
Шаталова А.Ю. 228, 354
Шаухин М.К. 41, 91
Шахов А.М. 227
Шванская Л.В. 112
Шведчикова Т.Ю. 280
Швецов А.В. 224
Шевельков А.В. 66
Шевердяев М.С. 186
Шеверев С.Г. 153
Шелестов В.М. 201
Шемардов С.Г. 110
Шенкарев З.О. 212, 226
Шерстюк Н.Э. 303
Шестакова А.П. 36
Шеховцов А.Н. 53
Шехтер А.Б. 221
Шехтман Л.И. 142
Шибаева Р.П. 45
Шилова О.А. 49, 143, 356, 372
Ширинян В.З. 247
Широков В.А. 229
Широков В.Б. 108
Ширшин Е.А. 215
Шишков В.А. 31, 122
Шишлина Н.И. 282, 290
Шкорняков С.М. 191
Шкуринов А.П. 88, 126
Шлектарев В.А. 201
Шленская Н.Н. 60
Шляпников Ю.М. 249
Шляпникова Е.А. 249
Шляхова Г.В. 329
Шмаков А.Н. 436
Шмидт А.Е. 224
Шнайдер Т. 339
Шнейдер А.Г. 90
Шпрунг М. 124
Штайнхофф Х.Ю. 216
Штейнман Э.А. 318
Штоцкий Ю.В. 148, 161
Штрикер А. 145, 192
Штыкова Э.В. 48, 146, 158, 172, 203, 242
Шубин Ю.В. 68
Шуваева В.А. 384
Шупегин М.Л. 159
Шуравин Н.С. 71

Шурухнов Н.Е. 411
Шушунов М.Н. 89, 146, 167

Щ
Щедрин Б.М. 151
Щербаков В.И. 335
Щербань В.В. 213
Щербина М.А. 147
Щерица О.В. 27
Щетинин И.В. 356
Щипалкина Н.В. 51
Щипунов Ю.А. 202
Щукина В.Д. 231

Э
Элиович Я.А. 141, 173, 183, 192
Эль-Регистан Г.И. 207
Эм В.Т. 138, 167
Эмирасланова Л.Л. 100
Эмиров Р.М. 330, 366
Энгельхард М. 216

Ю
Юданов Н.А. 399
Юдин С.Г. 310, 313, 418
Южаков А.В. 226
Юрасик Г.А. 355
Юров В.Ю. 401
Юрьева Э.А. 216
Юсупов В.И. 401
Юхно В.А. 68, 113

Я
Яблонский С.В. 321
Яблуновский К.А. 319
Ягубский Э.Б. 78
Якимов И.С. 147
Яковенко А.Г. 52
Якубович О.В. 51, 86
Якубовский А.Ю. 81, 408
Якунин С.Н. 136, 136, 205, 213, 216, 249, 315
Ямнова Н.А. 63
Яничева Н.Ю. 391
Янусова Л.Г. 151
Япаскурт В.О. 79, 105
Ясенко Е.А. 49
Ястребцев А.А. 356
Ясюлевич И.А. 63
Яценко А.В. 307
Яценко Д.А. 143, 193
Яцишина Е.Б. 280, 281, 282, 283, 285, 285, 288, 289, 290, 290, 291, 292
Яшина Е.Г. 58

A
Almasy L. 383
Angelov B. 360
Appavou M.S. 89
Armeev G.A. 226

B
Bagrov D.V. 226
Bertrand N. Moine 25
Brezesinski G. 200, 244

C
Coates C. 138

D
Dewhurst Ch. 191
Dobrowolski W. 108

G
Gluhov G.S. 226
Goodwin A.L. 138

I
Ioffe A. 89
Ismagulova T.T. 226

J
Jeffries C.M. 203
Jirak Z. 369

K
Kalkura S.N. 95
Kilanski L. 108
Kirpichnikov M.P. 226

L
Lin C.R. 367, 380
Lopatina A.V. 263

M
Mathon O. 328
Matyjasik S. 425
Miroshnikov K.A. 263
Monteseguro Padron V. 328
Mosslehy W. 226
Mulkidjanian A.Y. 226

N
Nishinaga T. 26

P
Pechnikova E.V. 263
Pipich V. 360

R
Ritter C. 75, 187

S
Samoylova L. 437
Schorr S. 187
Sedov A.S. 263
Semisalova A.S. 383
Severinov K.V. 263
Shaitan K.V. 226
Shih K.Ya. 367
Sinn H. 437
Skupinski P. 108
Snigirev A.A. 437
Snigireva Irina 423
Sokolova O.S. 263
Steinhoff H.J. 226
Szekely N.K. 360

V
Voskoboynikova N. 226

Сборник тезисов Первого Российского кристаллографического конгресса
21 – 26 ноября 2016

Председатель Конгресса

Ковальчук М.В.

Составители

Алексеева О.А., Благов А.Е., Волошин А.Э., Демин В.А., Дьякова Ю.А., Каблов Е.Н., Каневский В.М., Кашкаров П.К., Кирпичников М.П., Марченкова М.А., Нарайкин О.С., Овчинникова Е.И., Попов В.О., Терещенко Е.Ю., Штыкова Э.В., Яцишина Е.Б.

Материалы публикуются в авторской редакции методом прямого копирования.

Отпечатано в ООО «Издательско-полиграфический комплекс «НП-Принт»
190005, СПб, Измайловский пр., д.29
Тираж 1000 экз.