

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

**XLVIII Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

ФКС – 2014
10 – 15 марта 2014 г., С.-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2014

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников XLVIII Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2014), 10 – 15 марта 2014 г., С.-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the XLVIII PNPI School on condensed state physics (CSP - 2014). (10 – 15 of March, 2014, St. Petersburg).

Проведению Школы оказали поддержку:

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

Сборник подготовили С.В. Григорьев и К.В. Ездакова

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

© ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт», 2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции	4
10 марта, день 1	4
11 марта, день 2	8
12 марта, день 3	20
13 марта, день 4	28
14 марта, день 5	37
Доклады заседания рабочих групп по созданию приборной базы реактора ПИК	41
Стендовые доклады	49
Секция «Нейтронная дифракция»	49
Секция «Синхротронные и рентгеновские исследования»	78
Секция «Материалы и минералы»	99
Секция «Структура и свойства материалов»	132
Секция «Биология и физика»	156
Секция «Теория, модели и расчеты»	164
Список участников	185

Лекции

10 марта, день 1

Большой Адронный Коллайдер и бозон Хиггса (Нобелевская премия по физике 2013)

Я.И. Азимов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Лекция состоит из двух частей. В первой части рассказывается, что такое Большой Адронный Коллайдер. Во второй части обсуждается, зачем понадобился и почему и как был предсказан бозон Хиггса (точнее, Энглера-Браута-Хиггса). Недавние эксперименты на Большом Адронном Коллайдере дали наконец указания на частицу, предсказанную еще 50 лет назад. Это определило Нобелевских лауреатов по физике за 2013 год.

Магнетики без центра инверсии и поляризованные нейтроны

С.В. Малеев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Есть много магнетиков без центра инверсии (МБИ): В20 магнетики, мультиферроики, сверхтонкие пленки. Число таких систем должно расти. В них главным после обмена является взаимодействие Дзялошинского-Мория. Оно приводит к спиральной структуре и спиновой киральности. Поляризованные нейтроны лучший метод изучения этих явлений.

Реактор ПИК. Современное состояние и перспективы.

В.Л. Аксенов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В декабре 2013 г. завершилось строительство комплекса из 38 зданий и сооружений общей площадью 66 000 кв. метров. Сдача комплекса строителями (генеральный подрядчик – ЗАО «Концерн Титан-2», генеральный директор В.С. Рябов) происходила системно и поэтапно в течение 2013 года и завершилась 15 декабря.



После окончания оформительских процедур и сдачи построенного комплекса в эксплуатацию начнутся работы по наладке, испытанию и аттестации систем на соответствиенормативам, оформление разрешений на этапы энергетического пуска.

Будет построен необходимый по проекту для эксплуатации реактора ПИК комплекс изотопной очистки тяжелой воды отражателя.

Параллельно планируется проведение ряда мероприятий по совершенствованию построенных объектов, технологических систем и инженерной инфраструктуры реакторного комплекса ПИК в целях обеспечения возросших требований к безопасности ядерных установок, а также повышения привлекательности комплекса для международного научного сообщества. В декабре сданы на экспертизу два проекта по модернизации и реконструкции ряда технологических систем с реализацией в 2014 – 2019 гг.

Кроме того, в период 2014 – 2020 годы планируется разработка и реализация проекта оснащения реакторного комплекса ПИК современными экспериментальными станциями для проведения научных исследований.



В настоящее время по поручению Правительства РФ проводятся мероприятия по организации Международного центра нейтронных исследований на базе высокопоточного реактора ПИК. Важной составляющей проекта является привлечение пользователей широкого круга – физиков, химиков, биологов, материаловедов, инженеров. Реализация данного проекта позволит скоординировать и объединить усилия больших международных научных коллективов для работы на территории России, даст возможность молодежи принимать участие в исследованиях и в инновационных процессах во многих областях науки и техники.

11 марта, день 2

Металлическая наноспинтроника

В.В. Устинов

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В лекции освещаются физические основы, возможные перспективные приложения и особенности исторического развития активно прогрессирующей в последнее десятилетие научной дисциплины в физике конденсированного состояния вещества – спинтроники. Главное внимание уделено металлической наноспинтронике, приборы и устройства которой используют наноструктуры, содержащие ферромагнитные металлы, служащие естественным и эффективным инструментом воздействия на спины электронов проводимости и, тем самым, управления процессами электронного транспорта в магнитных наноструктурах.

Проиллюстрированы основные особенности электронных состояний в ферромагнитных металлах, приводящие к сильной спиновой асимметрии свойств носителей заряда и существенной спиновой зависимости кинетических (транспортных) свойств металлов, которая позволяет управлять свойствами магнитных металлических наноструктур различными внешними воздействиями.

Приводится классификация различных ветвей металлической спинтроники по видам внешних воздействий, ведущих к изменению магнитного порядка в наноструктурах и вытекающим из этого изменения эффектам в транспортных свойствах.

В заключение представлен пример использования поляризованных нейтронов для получения информации о магнитной структуре металлических сверхрешеток для спинтроники в Институте Лауэ-Ланжевена и демонстрируются прототипы новых спинтронных приборов и устройств, разработанных в Институте физики металлов Уральского отделения РАН (ИФМ УрО РАН): широкодиапазонные магниторезистивные датчики магнитного поля, спин-инжекционный управляемый магнитным полем мазер терагерцевого диапазона, безгистерезисные спиновые клапаны для высокочувствительных магниторезистивных сенсоров и другие элементы спинтроники.

Работы по металлической спинтронике, выполняемые в ИФМ УрО РАН коллективом Отдела наноспинтроники под руководством автора доклада, обеспечиваются в настоящее время грантом Президента Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ России (№НШ-6172.2012.2), грантами РФФИ (№12-02-12054-офи м и №13-02-00749), а также поддерживаются Программами фундаментальных исследований УрО РАН (проекты №12-Р-2-1051, 12-Т-2-1018, 12-2-2-009АРКТИКА). Автор от лица всех своих соавторов выражает благодарность всем организациям, финансирующим данную работу.

Обзор современных методик неупругого рассеяния, спектрометры реактора ПИК

Е.С. Клементьев

Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

Большинство проблем современной физики конденсированного состояния (ФКС) не может быть решено без детальной информации о динамических свойствах материалов, исследования элементарных возбуждений и квазичастиц: магнонов, фононов, экситонов, спинов, плазмонов, фазонов, солитонов и т.д. [1].

Неупругое рассеяние нейтронов (НРН) в конкуренции с прочими спектроскопическими методами доказало свою высокую эффективность и стало одной из ключевых методик в ведущих нейтронных центрах [2]. Высокая информативность нейтронной спектроскопии иллюстрируется рядом актуальных примеров из ФКС и материаловедения.

За несколько десятилетий экспериментальных и методических работ приборный парк НРН приобрел определенную структуру, выделились классы приборов, оптимальные для изучения квазичастиц заданного типа при использовании монокристаллических и поликристаллических образцов [3]. Обсуждается ряд революционных идей и подходов, которые способны на порядок увеличить информативность нейтронной спектроскопии.

НРН может стать одной из сильных сторон Центра нейтронных исследований на базе реактора ПИК, возможно возрождение этой методики в РФ после длительного периода застоя. Обсуждается выбор установок НРН и их ключевых параметров с учетом международного опыта ведущих нейтронных центров как на стационарных источниках нейтронов, так и на импульсных источниках «spallation» типа. Бурное развитие последних требует взвешенного подхода и поиска ниши, в которой спектрометры реактора ПИК были бы комплементарны спектрометрам импульсных источников нейтронов высокой интенсивности.

1. Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский, Квазичастицы в физике конденсированного состояния, Москва, Физматлит (2005).
2. H. Schober, Neutron Scattering Instrumentation, Ch. 3 in Neutron Applications in Earth, Energy and Environmental Sciences, eds. L. Liang et al., Springer (2009).
3. Neutron and X-Ray Spectroscopies, Eds. F. Hippert et al., Springer (2006).

Альтернатива He-3: детекторы нейтронов на основе новых стеклокомпозитных сцинтилляторов

М.В. Коржик¹, Г.А. Досовицкий², А.Е. Досовицкий²

¹ *Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Беларусь*

² *НеоХим, ЗАО, Москва, Россия*

Детекторы тепловых нейтронов широко используются как в научных исследованиях, так и при решении прикладных задач (обнаружение делящихся материалов, контроль работы ядерных реакторов, геологические исследования). На сегодняшний день наиболее широко используемым типом нейтронных детекторов является газовый детектор на основе ^3He . Высокая стоимость ^3He и его дефицит подтолкнули поиск альтернативных решений, одним из которых являются сцинтиллирующие стекла, содержащие ^6Li .

Литий-содержащие сцинтилляционные стекла обеспечивают эффективность регистрации нейтронов аналогичную детекторам на ^3He [1]. Более того, стекла обладают перед газовыми детекторами преимуществом свободы выбора формы чувствительного элемента, что позволяет конструировать на их основе позиционно-чувствительные детекторы.

В представляемом докладе рассматриваются требования к сцинтилляторам для детектирования нейтронов и их основные типы. В качестве перспективного типа материалов с высоким потенциалом использования предлагается концепция стеклокомпозитного сцинтиллятора [2] и рассматривается ее реализация в разработанном материале.

Стеклокомпозитный сцинтиллятор изготавливается путем выплавки стекла определенного состава с последующей его управляемой кристаллизацией. Полученный таким образом материал имеет более высокий выход сцинтилляций и смещенный спектр эмиссии по сравнению с аморфным стеклом. Считывание сцинтилляционного отклика возможно классическим способом при помощи фотоэлектронного умножителя, а также с помощью получающего распространение в последнее время т.н. кремниевого фотоэлектронного умножителя (англ. - SiPM), что открывает возможность для конструирования позиционно-чувствительных детекторов.

1. "The ^3He supply crisis and alternative techniques to ^3He based neutron detectors for neutron scattering applications", Rep. on meeting at FRM II, Munich, 7-8 Jul. 2009
2. А.Е. Dosovitskiy, G.A. Dosovitskiy, M.V. Korjik, "Development of the new generation of glass-based neutron detection materials", SPIE Optics + Photonics, San Diego CA, USA, 12-16 Aug. 2012

Приборная программа реактора ПИК

Е.В. Москвин

Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия

В докладе рассматривается концепция приборной базы реакторного комплекса ПИК, строительство которого ведется на территории ПИЯФ.

В настоящее время завершен этап капитального строительства. Наступил этап строительства инженерных сооружений (холодные источники, нейтроноводная система и т.п.) и коммуникаций и самого главного, для чего собственно и строится реактор – физических установок для исследований с использованием нейтронного излучения.

В 2010 году между центром Гельмгольца Гесрахта (HZG) и ПИЯФ было заключено соглашение о сотрудничестве, в рамках которого было принято решение о переносе физического оборудования (7 физических установок) с реактора FRG-II на реактор ПИК. Они будут размещены в нейтроноводном и реакторном залах нового комплекса после необходимой модернизации и адаптации к новым условиям.

В 2013 году между Институтом Лауэ Ланжевена (ILL) и ПИЯФ был подписан меморандум о понимании, в рамках которого будет осуществлена консультативная помощь при проектировании и строительстве новых установок на реакторе ПИК. Также в этом же году между немецким центром нейтронных исследований и ПИЯФ был подписан меморандум о сотрудничестве, в рамках которого немецкой стороной предполагается строительство 5 нейтронных установок на ПИКе. Вместе с установками, запланированными сотрудниками ПИЯФ (порядка 30), все эти установки составят парк новых установок высокопоточного реактора ПИК.

Приборная база реактора ВВР-М: старый конь борозды не портит.

С.В. Григорьев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Научно-исследовательский реакторный комплекс ВВР-М является одной из базовых установок ПИЯФ, на которой ведутся фундаментальные и прикладные исследования в области ядерной физики, физики конденсированного состояния, развиваются нейтронные методы исследования вещества, радиационное материаловедение, радиобиология, производится наработка радионуклидов для медицинских целей. ВВР-М является уже более 50 лет стабильно работающей ядерной установкой и по своим параметрам остается лучшим в России исследовательским реактором непрерывного действия.

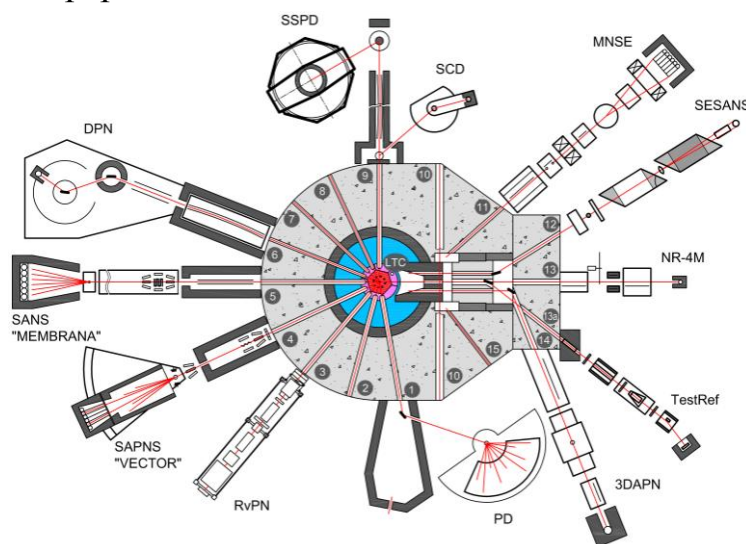


Рис.1. План расположения нейтронных установок научно-образовательного центра на реакторе ВВР-М.

начата работа по созданию научно-образовательного центра, включающего в себя 12 научных нейтронных установок различного типа. На рисунке 1 представлена схема расположения установок научно-образовательного центра, которую планируется реализовать концу 2015 году. В таблице жирным шрифтом указаны действующие установки реактора, а наклонным шрифтом – установки, предназначенные к техническому переоснащению в ближайшие 2 года. Действующие установки – это 2 порошковых дифрактометра и 1 монокристалльный дифрактометр поляризованных нейтронов, 2 установки малоуглового рассеяния нейтронов, 1 рефлектометр и 1 нейтронный поляриметр с дополнительной возможностью переключения на спин-эхо малоугловое рассеяние нейтронов.

Перспективы развития нейтронных исследований теснейшим образом связаны с подготовкой высококвалифицированных специалистов. Реакторный комплекс уже сейчас является базовой установкой для студентов физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета, где создана для этого кафедра ядерно-физических методов исследования.

В ПИЯФ НИЦ «КИ»

Канал	Прибор
Канал № 1 PD	48-счётчиковый порошковый дифрактометр
Канал № 3 RvPN	Рефлектометр поляризованных нейтронов с вертикальной плоскостью рассеяния "Реверанс"
Канал № 4 SAPNS "Vector"	Малоугловой дифрактометр поляризованных нейтронов "Вектор"
Канал № 5 SANS "Membrana"	Малоугловой дифрактометр
Канал № 6 DPN	Дифрактометр поляризованных нейтронов
<i>Канал № 9a SCD</i>	<i>Четырехкружный монокристалльный дифрактометр дифрактометр</i>
Канал № 9б SSPD	Секционный суперпозиционный порошковый дифрактометр
<i>Канал № 11 MNSE</i>	<i>Установка "Модуляционное спин-эхо рассеяние нейтронов "</i>
<i>Канал № 12 SESANS</i>	<i>Установка спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов</i>
Канал № 13 NR-4M	Рефлектометр NR-4M
<i>Канал № B13 TEST-REF</i>	<i>Тестовый рефлектометр</i>
Канал № 14 VAP-3D	Нейтронный поляриметр

Сегодня студенты и аспиранты кафедры готовят курсовые и дипломные работы на нейтронных станциях реактора ВВР-М. Преподаватели кафедры и сотрудники ПИЯФ читают лекции по нейтронному рассеянию и подготовили серию лабораторных работ по нейтронной дифракции, нейтронной рефлектометрии и малоугловому рассеянию нейтронов. Будущее реактора ВВР-М обусловлено в первую очередь организацией удобного доступа к нейтронным станциям для студентов, аспирантов, специалистов смежных с физикой областей, таких как биология и химия. Реактор ВВР-М обладает широкими возможностями и огромным потенциалом в качестве центров коллективного пользования. Его планируется использовать в качестве ресурсного центра СПбГУ.

Таким образом, ВВР-М является на сегодняшний день удобной площадкой для организации образовательного процесса студентов и аспирантов российских ВУЗов и центра коллективного пользования для всего научного сообщества России.

Методика спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов для исследования свойств фундаментальных взаимодействий

В.В. Воронин

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В лекции рассмотрена возможность создания нового ультрапрецизионного метода исследования свойств взаимодействий нейтрона с окружающей материей. Новый подход основан на методике спин-эхо малоуглового рассеяния, который, в совокупности с некоторыми особенностями динамической дифракции нейтронов по Лауэ в совершенных кристаллах, позволяет получить чрезвычайно высокую чувствительность к малейшим изменениям волнового вектора нейтрона, недостижимую другими методами.

***In-situ* анализ процессов зарядки/разрядки Li-ионных аккумуляторов
методом нейтронной дифракции**

И.А. Бобриков¹, А.М. Балагуров¹, Чих Хао Ли², Чих Вэй Ху², Санга Дэлэг¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Национальный университет Тсин Хуа, Тайвань

Сообщаются результаты нейтронных дифракционных экспериментов, выполненных в режиме реального времени с Li-ионными аккумуляторами, в одном из которых в качестве катода использовался чистый LiFePO₄, а в другом LiFePO₄ допированный ванадием. Эксперименты были проведены на ФДВР дифрактометре (импульсный реактор ИБР-2, ЛНФ ОИЯИ) с использованием метода времени пролета (TOF). Основными задачами экспериментов были: отработка методики работы на дифрактометре по времени пролета с коммерческими аккумуляторами в режиме *in-situ*, сравнительный анализ поведения аккумуляторов и получение информации о микроструктуре электродных материалов. Дифракционные данные набраны за три полных цикла заряда/разряда, реализованных с низкой скоростью (0.1 С) при комнатной температуре (~17°C). В *in-situ* эксперименте хорошо наблюдается пошаговое возникновение новых LiC_n фаз при внедрении в графит ионов лития и фазовый переход LiFePO₄ ↔ FePO₄. Проведенные эксперименты показали, что экспериментальная база на реакторе ИБР-2 хорошо подходит для характеристики структуры электродов Li-аккумуляторов, находящихся не только в стационарном состоянии, но и в рабочем процессе.

Структура и магнетизм многослойных наносистем Fe/MgO/Fe

*Е.М. Якунина¹, В.И. Боднарчук², В.В. Проглядо¹, Т. П. Креницина¹,
Е.А. Кравцов¹*

¹Институт физики металлов, Екатеринбург, Россия

²Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Многослойные наносистемы Fe/MgO/Fe, благодаря наблюдаемому в них эффекту гигантского туннельного магнетосопротивления (ГТМС), представляют большой технологический интерес в качестве элементов устройств наноспинтроники. Эффект ГТМС в данных структурах обусловлен туннелированием электронов между слоями Fe через диэлектрическую прослойку MgO. В настоящей работе мы сообщаем о зависимости структурных и магнитных свойств системы Fe/MgO/Fe от толщины диэлектрической прослойки MgO.

Методом высоковакуумного магнетронного распыления была получена серия образцов (001)MgO//Fe(200Å)/MgO(tÅ)/Fe(50Å)/Ta(50Å). Толщина туннельного барьера MgO менялась в диапазоне $t = 10-30$ Å. В процессе роста структуры отжигались при температурах 300-500°C. Структурные исследования, проведённые с помощью рентгеновской дифрактометрии, подтвердили формирование слоистой структуры, а также кристаллической структуры (001) в слоях Fe. Из анализа магнитометрических данных установлено, что слои Fe перемагничиваются в разных полях. Вывод о одновременном перемагничивании слоев Fe подтверждается результатами поляризационной нейтронной рефлектометрии (REFLEX-P на реакторе ИБР-2).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 14-02-00013) и НШ-1540.2014.2.

Тайна парамагнитной фазы твердых растворов $Mn_{1-x}Fe_xSi$

С.В. Демисhev¹, И.И. Лобанова^{1,2}, С.В. Григорьев³

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

² Московский физико-технический институт (ГУ), Долгопрудный, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Необычная T - x магнитная фазовая диаграмма системы $Mn_{1-x}Fe_xSi$ характеризуется наличием двух квантовых критических точек $x^* \sim 0.11$ и $x_c \sim 0.24$ [1], что приводит к ряду нетривиальных особенностей физических свойств в различных магнитных фазах. В настоящей работе исследованы температурные ($T < 60$ К) и полевые ($B < 5$ Тл) зависимости намагниченности $M(B, T)$ у твердых растворов $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в области составов $x < 0.3$. Обнаружено, что полевые зависимости намагниченности $M(B, T = \text{const})$ в парамагнитной фазе демонстрируют скейлинговое поведение вида $B \partial M / \partial B - M = F(B / (T - T_s))$, где T_s обозначает эмпирически определенную температуру перехода в фазу с промежуточным магнитным порядком [1,2], а $F(\xi)$ обозначает универсальную скейлинговую функцию для данного состава. Выполнение скейлинговых соотношений приводит к выводу о том, что намагниченность в парамагнитной фазе $Mn_{1-x}Fe_xSi$ является суммой двух вкладов. Первый вклад насыщается по скейлинговой переменной $\xi = B / (T - T_s)$, в то время как второй вклад линейно зависит от магнитного поля. Для описания намагниченности найдена простая аналитическая формула, позволяющая выполнить оценку параметров, характеризующих локализованные магнитные моменты в исследуемой системе. Предложена модель, связывающая структуру намагниченности с магнитными нанонеоднородностями (сильно коррелированными кластерами, имеющими размер порядка элементарной ячейки). Показано, что парамагнитная фаза $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в приближении среднего поля описывается двумя парамагнитными температурами $T^*(x)$ и $T_s(x)$, первая из которых соответствует взаимодействию внутри кластера, а вторая – межкластерному взаимодействию. Найдено, что характеристики среднего поля у $Mn_{1-x}Fe_xSi$ имеют особенности в окрестности квантовых критических точек: $T^*(x)$ меняет знак в окрестности x^* , а $T_s(x)$ обращается в ноль в области $x \geq x_c$. Полученные данные позволяют уточнить аналогию между спиральными магнетиками и жидкими кристаллами [3] и сопоставить парамагнитную фазу с фазой изотропной жидкости. Работа поддержана программой РАН «Сильно коррелированные электроны» и проектом РФФИ 13-02-00160.

1. S.V. Demishev, et al., JETP Lett. **98**, 829 (2013)
2. S. V. Grigoriev, et al., Phys. Rev. B **83**, 224411 (2011)
3. S. Tewari, et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 047207 (2006)

Структурная и магнитная киральность Cu_2OSeO_3

В.А. Дядькин

Swiss-Norwegian Beamlines at the ESRF, Grenoble, France

С помощью малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов и резонансного вклада в дифракцию синхротронного излучения на монокристаллах были изучены, соответственно, магнитная и структурная киральности в изоляторе-магнетоэлектрике Cu_2OSeO_3 . Данное соединение образует структуру с пространственной группой $P2_13$, которая также характерна для других, более простых, киральных металлических магнетиков семейства силицида марганца MnSi (FeGe , MnGe , $\text{Mn}_{1-x}\text{Si}_x\text{Ge}$, $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$, $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$). Как было недавно показано, в этих металлических соединениях две киральности, структурная и магнитная, однозначно связаны друг с другом как в основной геликоидальной [1], так и в скирмионной фазах [2].

В данной работе измерена спиновая киральность образца Cu_2OSeO_3 путём сравнения паттернов рассеяния поляризованных нейтронов с эталонным образцом MnSi , который хорошо изучен, и в котором левая магнитная спираль возникает только в левой кристаллографической структуре [1]. Кристаллографическая киральность Cu_2OSeO_3 определена при измерении абсолютной структуры с уточнённым параметром Флака.

Таким образом, было определено, что обе киральности в Cu_2OSeO_3 совпадают, также, как это наблюдается в случае MnSi , MnGe , $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$. Важно отметить, что в соединениях FeGe , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ наблюдается обратная корреляция, т. е. левая структура производит правую магнитную спираль. При этом, соотношение между киральностями в Cu_2OSeO_3 противоположно тому, которое было предсказано в теоретической работе [3], и, таким образом, данное противоречие требует пересмотра теоретических подходов к описанию возможных микроскопических механизмов, дающих вклад в феноменологическое антисимметричное магнито-упругое взаимодействие.

1. S.V. Grigoriev et al., Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 207201.
2. D. Morikawa et al., Phys. Rev. B 88 (2013) 024408.
3. V. Chizhikov et al., arXiv:1305.5382 (2013).

Киральная катастрофа модели Бака-Йенсена в $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$

С.В. Григорьев^{1,2}, *S.-A. Siegfried³*, *Е.В. Алтынбаев^{1,2}*, *Н.М. Чубова¹*, *В.А. Дядькин^{1,4}*,
Д.Ю. Чернышов^{1,4}, *Е.В. Москвин^{1,2}*, *А.В. Цвященко⁵*, *С.В. Малеев¹*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴Swiss-Norwegian Beamlines at the ESRF, Grenoble, France

⁵Институт физики высоких давлений, Троицк, Россия

Методом малоугловой дифракции нейтронов и СКВИД магнетометрии исследована магнитная структура нецентросимметричных кубических магнетиков типа $B20$ – моногерманидов твердых растворов переходных металлов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$. Соединения $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ магнитно упорядочены в плоскую спиновую спираль, которая характеризуется несколькими параметрами: T_C , S , k , и H_{C2} . Температура упорядочения T_C и средний спин элементарной ячейки S плавно уменьшаются с концентрацией x от максимума для FeGe до нуля для соединений с $x = 0.9$. Волновый вектор k меняется с x от некоторого значения $|k| = 0.09 \text{ нм}^{-1}$ для FeGe , через минимум при $x_C = 0.6$ ($|k| \rightarrow 0$), к величине $|k| = 0.14 \text{ нм}^{-1}$ при $x = 0.8$. Наблюдаемое превращение спиновой спирали в ферромагнетик при x_C сопровождается изменением знака магнитной киральности для соединений с $x > x_C$ и $x < x_C$. Величина критического поля перехода из конической в ферромагнитную фазу H_{C2} линейно уменьшается с концентрацией x до минимума при x_C , а затем растет, дублируя поведение зависимости $k(x)$

Известно, что параметры системы k , и H_{C2} взаимосвязаны и определяются через константы обменного интеграла J и постоянной Дзялошинского D в модели Бака-Йенсена как: $k = D/J$ и $SJk^2 = g\mu_B H_{C2}$ [1,2]. Из экспериментальных данных получена оценка величины обменного интеграла J и постоянной Дзялошинского D в зависимости от x . Установлено, что постоянная D не зависит от x по величине, но меняет знак при x_C . Обменный интеграл J является расходящейся функцией аргумента $|x-x_C|$, то есть стремится к бесконечности при x_C . При этом температура упорядочения T_C соединения с концентрацией x_C конечна и равна 120 К. Факт стремления к бесконечности обменного интеграла в окрестности x_C , сопровождаемый скачкообразным изменением знака константы Дзялошинского был назван киральной катастрофой модели Бака-Йенсена в соединениях $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$.

Можно было бы усомниться в применимости модели, однако модель уверенно дает величину константы Дзялошинского $D/a \approx 1 \text{ мев}$ для всего ряда исследуемых соединений, причем эта величина характерна также и для соединений моносилицидов переходных металлов $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ соединений.

1. P. Bak and M. H. Jensen, J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, L881 (1980).

2. S.V. Maleyev, Phys.Rev. B, **73**, (2006) 174402

12 марта, день 3

За пределами кинематической дифракции

В.Е. Дмитриенко

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Подавляющее большинство исследований атомной структуры проводится с рентгеновским (в частности, синхротронным) излучением в условиях кинематического рассеяния, т. е. первого борновского приближения в теории рассеяния. В этом приближении предполагается, что падающая на рассеивающий объект волна испытывает только однократное рассеяние и не изменяет своей интенсивности за счёт рассеяния (но её интенсивность может уменьшаться за счёт поглощения). Интенсивности рассеянного под разными углами излучения оказываются пропорциональными квадратам модулей Фурье-гармоник плотности объекта, и из них можно сравнительно легко получить даже заранее не известную структуру объекта. Такое же приближение используется в структурных и магнитоструктурных нейтронных исследованиях. Однако хорошо известно, что, например, в совершенных кристаллах кинематическое приближение может не работать, приходится учитывать многократное когерентное рассеяние, и большое число работ посвящено соответствующей динамической теории дифракции.

В настоящем докладе обсуждаются некоторые экзотические, но достаточно простые ситуации, когда кинематического приближения недостаточно.

1) Проходящая через кристалл волна испытывает вблизи области дифракции существенное двупреломление, которое может приводить к изменению её поляризации [1]. В настоящее время это явление используется на синхротронах для преобразования поляризации (рентгеновская четвертьволновая пластинка и т.п.).

2) Возникающая в области сильной дифракции когерентная суперпозиция плоских волн (блоховская волна) может иметь очень малое поглощение (эффект Бормана), и это явление можно использовать для разделения различных вкладов (дипольного, квадрупольного и т.д.) в резонансное поглощение [2].

3) Область дифракции в кристалле может обладать топологическим инвариантом и связанной с этим инвариантом сингулярностью в поле волны [3].

4) Из-за малости поглощения, в случае нейтронов возможна дифракция типа Рамана-Ната [4].

Работа выполнена при поддержке программ Президиума РАН "Фундаментальные основы технологий наноструктур и наноматериалов" и "Физика высокого давления".

1. В.Е. Дмитриенко, В.А. Беляков. О преобразовании поляризации рентгеновских лучей в монокристаллах. *Письма в ЖТФ*. **6**, 1440 (1980).
2. R.F. Pettifer, S.P. Collins, D. Laundry. Quadrupole transitions revealed by Borrmann spectroscopy. *Nature*. **454**, 196 (2008).
3. V.E. Dmitrienko, Diffraction in crystals and topology. *J. Phys I France*. **1**, 1187 (1991).
4. S.V. Grigoriev, A.V. Syromyatnikov, A.P. Chumakov, N.A. Grigoryeva, K.S. Napolskii, I.V. Roslyakov, A.A. Eliseev, A.V. Petukhov, and H. Eckerlebe. Nanostructures: Scattering beyond the Born approximation. *Phys. Rev. B*. **81**, 125405 (2010).

Рентгеновские методы исследования жидких поверхностей

О.В. Коновалов

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Результатом экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей в скользящей геометрии является информация о строении различных двумерных систем с характерными размерами внутренней структуры от нескольких ангстрем до микрона. Данная методика используется для всестороннего изучения структуры широкого класса конденсированного вещества и, в частности, для характеристики «мягкого конденсированного вещества» (Soft condensed matter), к которому относятся такие объекты как жидкости, полимеры, гели, самоорганизованные моно- и мульти-молекулярные слои органических молекул на водной поверхности (например, модели клеточных мембран), коллоидные системы, мицеллы, полимерные пленки, двумерные белковые кристаллы и множество других систем, структурированных на нано-, мезо- и микроскопическом масштабе.

В докладе дается обзор и теоретическая основа рентгеновских методов чувствительных к строению поверхности. Рассмотрены такие методы как: рентгеновская рефлектометрия; широкоугольная диффракция в скользящей геометрии (GID –Grazing Incidence Diffraction); диффузное рассеяние в скользящей геометрии; малоугловое рассеяние в скользящей геометрии (GISAXS - Grazing Incidence Small Angle Scattering); и флюоресценция в режиме полного внешнего отражения. Эти методы проиллюстрированы примерами исследований на интерфейсах жидкости и ряда других систем «мягкого конденсированного вещества». В докладе использованы результаты полученные на синхротронной экспериментальной станции ID10, расположенной в Европейском Центре Синхротронного Излучения (ESRF, Гренобль, Франция) и предназначенной для исследования жидких поверхностей.

Рентгенографические исследования однослойных и многослойных углеродных нанотрубок

Д.В. Логинов¹, Л.А. Алешина¹, А.Н. Макарова¹

¹ Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

В работе исследовались образцы однослойных и многослойных углеродных нанотрубок (УНТ). Рентгенографирование проводилось на автоматизированном дифрактометре ДРОН-6 в MoK_α -излучении в геометрии на просвет, в интервале углов от 2 до 145° . Из экспериментальных данных были рассчитаны кривые распределения интенсивности рассеяния $I(s)$, s -взвешенной интерференционной функции $H(s)$ и парных функций $D(r)$ (рис. 1).

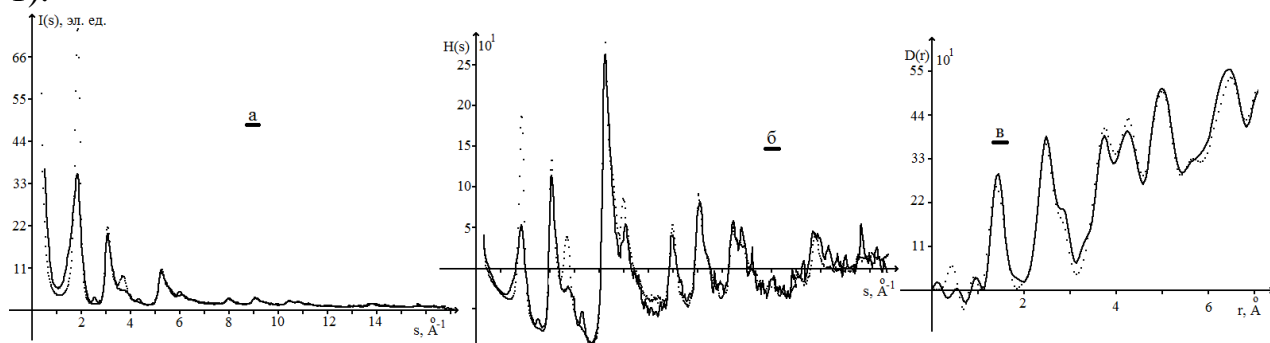


Рис. 1. Кривые распределения $I(s)$ (а), $H(s)$ (б), $D(r)$ (в): — однослойные УНТ, --- многослойные УНТ; s - длина дифракционного вектора

Из рис. 1 видно, что наблюдается четко выраженное различие кривых $I(s)$, $H(s)$ и $D(r)$ для образцов одно- и многослойных УНТ. В первую очередь на кривых $I(s)$ и $H(s)$ однослойных УНТ максимум в области 1.8Å^{-1} , соответствующий по положению отражению (002) графита, гораздо менее интенсивный. Присутствие этого максимума на рентгенограммах образцов УНТ, может свидетельствовать с одной стороны об их многослойности, с другой - о наличии в образце упаковок графеновых слоев.

Рассчитанные из кривых распределения парных функций $D(r)$ значения радиусов первых трех координационных сфер, соответствующие внутрисеточным межатомным расстояниям совпадают. Координационные числа для однослойных и многослойных УНТ совпадают на первых двух сферах и отличаются на 3-й: для однослойных УНТ координационное число выше, чем у однослойных и у графита. Радиус четвертой координационной сферы многослойных УНТ на 0.05Å , а четвертое координационное число на 1.5 атома меньше, чем у однослойных.

Для получения более детальной информации о структурном состоянии образцов, содержащих однослойные и многослойные углеродные нанотрубки, в настоящее время выполняется компьютерное построение атомных конфигураций в области ближнего упорядочения.

Рентгеновский интерферометр на основе двух параллельных микро - зеркал

М. Любомирский¹, И. Снигирёва¹, С. Кузнецов², В. Юнкин² и А. Снигирёв¹

¹ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

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

С развитием новых рентгеновских источников - синхротронов третьего поколения и рентгеновских лазеров на свободных электронах, большое внимание уделяется развитию различных схем интерферометрии в диапазоне жесткого рентгеновского излучения. Особое место здесь занимают схемы, выполненные по аналогии с двойным зеркалом Френеля, при последовательном расположении зеркал [1, 2].

В этой работе мы предлагаем новую схему зеркального интерферометра при параллельном расположении микро-зеркал, когда отражающие поверхности расположены одна над другой. Данная организация зеркал позволяет существенно упростить процесс юстировки и является аналогом схемы интерферометра Юнга с очень тонкими щелями. Развитие технологий кремниевого травления позволяет профилировать кремний на большие глубины с сохранением высокого качества поверхности – боковых стенок [3]. Использование отражения рентгеновского излучения от стенок в протравленной структуре позволяет расположить отражающие поверхности в кристалле на любом расстоянии друг относительно друга, что существенно упрощает применение зеркального интерферометра для решения широкого круга задач в различных экспериментальных условиях. Они могут быть использованы как для исследования когерентных свойств рентгеновских источников, так и для метрологии и диагностики в широком энергетическом диапазоне.

Существенным достоинством использования планарной технологии является возможность создания интегральных рентгено-оптических систем объединяющих на одной пластине преломляющие линзы [3], многолинзовые [4] и зеркальные интерферометры.

1. K. Fezzaa, F. Comin, S. Marchesini, R. Coïsson, M. Belakhovsky, *Journal of X-ray science and technology*, 7 (1997) 12-23.
2. W. Leitenberger, U. Pietsch, *J. Synchrotron Rad.*, 14 (2007) 196-203.
3. A. Snigirev, I. Snigireva, M. Grigoriev, V. Yunkin, M. Di Michiel, S. Kuznetsov, G. Vaughan, *SPIE* 6705 (2007), 670506.
4. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, V. Yunkin, S. Kuznetsov, M.B. Grigoriev, T. Roth, G. Vaughan, C. Detlefs, *Phys. Rev. Lett.*, 103 (2009) 064801.

Исследование многослойных структур методом рентгеновской микроскопии с использованием преломляющей оптики

*С. Медведева¹, И. Лятуш¹, П. Ершов¹, А. Гойхман¹, И. Снигирева^{1,2},
А. Снигирев^{1,2}*

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

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Сегодня на источниках синхротронного излучения во всем мире все большее внимание уделяется развитию методов рентгеновской микроскопии на основе дифракционной и рефракционной оптики. Эти мощные исследовательские методы не требуют сложных оптических схем, а также специальной подготовки образцов. Наиболее актуальные работы в данной области посвящены исследованию кремниевых гетероструктур (SOI) [1] и фотоэлементов [2].

Для рентгеновской микроскопии в данной работе были использованы составные преломляющие линзы (CRL) [3]. Нами были исследованы две многослойные структуры состоящие из чередующихся трех пар ZrO_x/SiO₂ слоёв с толщиной каждого слоя 500 и 200 нм соответственно. Структуры были изготовлены методом ионно-плазменного напыления в научно-образовательном центре «Функциональные наноматериалы» Балтийского Федерального Университета им. И. Канта, Россия.

Многослойные структуры были изучены с помощью метода просвечивающей и сканирующей рентгеновской микроскопии на станции ID06 в Европейском Центре Синхротронного Излучения (Гренобль, Франция).

Экспериментально было получено увеличенное в 46 раз изображение и профиль поглощения многослойной структуры. На основании полученных результатов, можно сделать вывод о перспективности использования рентгеновского микроскопа для комплексного исследования многослойных структур, в том числе непосредственно для анализа их интерфейсов.

1. A.Ying, B. Osting, I. Noyan, C. Murray, M. Holt and J. Maser., "Modeling of kinematic diffraction from a thin silicon film illuminated by a coherent, focused X-ray nanobeam", J. Appl. Crystallogr. 43 (3), 587-595, 2010
2. M.Bertoni,D. Fenning,M. Rinio,V. Rose,M. Holt,J. Maser and T. Buonassis,"Nanoprobe X-ray fluorescence characterization of defects in large-area solar cells", Energy Environ. Sci., 4, 4252, 2011A.
3. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva and B. Lengeler , "A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays", Nature, vol. 384, 49-51, 1996

XAFS и XMCD методики в исследовании влияния катионного замещения на структурные и магнитные свойства оксиборатов на основе $\text{Co}_{3-x}\text{Me}_x\text{VO}_5$

*М.С. Платунов¹, С.Г. Овчинников^{1,2}, В.Н. Заблуда¹, Н.Б. Иванова²,
Н.В. Казак¹, Ю.В. Князев², А. Rogalev³, F. Wilhelm³, E. Weschke⁴, E. Schierle⁴,
Я.В. Зубавичус⁵*

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

²*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

³*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

⁴*Helmholtz-Zentrum Berlin, Berlin, Germany*

⁵*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Оксибораты переходных металлов с кристаллической структурой людвигита (пространственная группа $P6am$) интенсивно исследуются благодаря большому разнообразию электрических и магнитных свойств, которые они проявляют [1, 2]. К сожалению, локальные электронные и магнитные свойства переходных элементов в этих кристаллах практически не изучены. Настоящее XAFS/XMCD-исследование в области мягкого и жесткого рентгеновского излучения (K - и $L_{3,2}$ -края Co и Fe) на монокристаллах Co_3VO_5 и Co_2FeVO_5 выполнено впервые. Составы Co_3VO_5 и Co_2FeVO_5 являются ферромагнетиками с ярко выраженной одноосной магнитной анизотропией: Co_3VO_5 ($T_C = 42$ К), Co_2FeVO_5 ($T_{N1} = 115$ К, $T_{N2} = 70$ К). При этом образец Co_2FeVO_5 показывает экстраординарное увеличение коэрцитивной силы [1].

XAFS/XMCD эксперименты на K -краях кобальта и железа выполнены на станции ID12 (ESRF), а также на станции СТМ НИЦ «Курчатовский институт». Эксперименты на $L_{3,2}$ -краях кобальта и железа выполнены на станции UE46_PGM-1 (BESSY). XMCD спектры на K -краю кобальта показывают резкий пик в предкраевой области (квадрупольные переходы в $3d$ состояния) в отличие от железа, структура которых сложнее. При этом весьма различное поведение наблюдается на K -краях кобальта и железа (дипольные переходы в $4p$ состояния). Спектры на $L_{3,2}$ -краях демонстрируют широкую мультиплетную структуру, подтверждая оксидное состояние кобальта (Co^{2+}) и железа (Fe^{3+}). Анализ спинового и орбитального вкладов в полный магнитный момент, выполненный с использованием правил сумм [3], показал разный знак спиновых моментов Co и Fe .

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №№ 12-02-00175 а, 13-02-00958 а, 13-02-01265 а, 14-02-31051 а), гранта Президента РФ (ИШ - 2886.2014.2). Эксперименты на ESRF были выполнены в рамках проекта № HE 3672.

1. N.B. Ivanova, et al. JETP 113 (6), 1015 (2011).
2. M.S. Platunov, et al. JETP Lett. 96, 650 (2013).
3. B. T. Thole, et al., PRL. 68, 1943 (1992); P. Carra, et al., PRL. 70, 694 (1993).

Компактная установка малоугловой рентгеновской дифракции высокого разрешения с изменяемой площадью засветки образца

*А.П. Чумаков¹, К.С. Напольский², А. Снугирёв³,
И. Снугирёва³, А.А. Елисеев², С.В. Григорьев¹*

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

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

³ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Предложена схема компактной установки ультрамалоугловой дифракции рентгеновского излучения с изменяемой площадью засветки образца. Эксперимент проводился на станции ID-06 “Microoptocs” (ESRF, Гренобль, Франция). Используя набор бериллиевых параболических рефракционных линз (30 шт.) с радиусом кривизны 200 мкм пучок синхротронного излучения (СИ) с энергией 12 кэВ ($\lambda = 1 \text{ \AA}$) фокусировался в области высокоразрешающего детектора (1376×1040 точек с размером 0,645×0,645 мкм²) на расстоянии 1,45 м. Новизна схемы заключалась в идее перемещения образца между линзами и детектором вдоль оси пучка, изменяя при этом площадь его засветки. Площадь засветки также регулировалась щелью, расположенной перед линзами, размером 0,5×0,5 или 0,2×0,2 мм², что вблизи детектора (на расстоянии 16 мм) позволило получить поперечное сечение пучка 7,5 и 4,2 мкм соответственно.

В качестве тестового образца была использована мембрана анодного Al₂O₃ толщиной 96 мкм с самоупорядоченной структурой пор (диаметр пор - 40 нм, расстоянием между их центрами - 102 нм). Мембрану располагали перпендикулярно падающему пучку на расстоянии от 246 до 16 мм от детектора, что позволяло регулировать размер засвечиваемой области от 87 до 4,2 мкм. Таким образом, удавалось сфокусироваться в области одного или нескольких доменов пористой структуры. Установлено, что размытые в азимутальном и радиальном направлении гексагонально упорядоченные дифракционные максимумы состоят из множества узких пиков высокой интенсивности (точечных рефлексов), количество которых уменьшалось до нескольких штук при уменьшении площади засветки образца. Анализ отдельных точечных рефлексов позволил установить, что внутри одного домена поры имеют высокую степень упорядочения в поперечном направлении и являются прямолинейными на протяжении всей толщины мембраны, тогда как стандартно применяемая методика анализа всей площади дифракционного пика [1] даёт усреднённую информацию, искажая данные об особенностях реальной структуры образца. Упорядочение пор в соседних доменах сильно различается, искривление или прекращение роста пор происходит преимущественно на доменной границе. Предлагаемая методика может быть успешно применена для исследования структуры различных мезоскопических материалов.

1. K.S. Napolskii, I.V. Roslyakov, et al., J. Appl. Cryst., **43** (2010) 531–538.

Детекторы ионизирующих излучений на основе компенсированного арсенида галлия

О.П. Толбанов

Томский государственный университет, Томск, Россия

В докладе представлен анализ состояния дел по разработке квантово-чувствительных детекторов на основе арсенида галлия, компенсированного хромом. Предложены варианты технологии полуизолирующего арсенида галлия (SI-GaAs<Cr>), позволяющей снизить концентрацию антиструктурных дефектов, глубоких донорных EL2⁺ центров, являющихся эффективными центрами захвата неравновесных электронов из ионизационного трека. Оригинальная технология позволяет получать SI-GaAs<Cr> структуры с предельно высоким удельным сопротивлением, $\rho(x) \rightarrow \rho_{\max}$, (ρ_{\max} - экстремально возможное сопротивление SI-GaAs<Cr> структуры), которые являются наиболее перспективным материалом для детекторов заряженных частиц и квантов рентгеновского и гамма излучений. Показано, что на основе SI-GaAs<Cr> материала формируются p-i-n структуры резистивного типа с электрофизическими характеристиками:

- толщина чувствительного слоя до 1,2 мм;
- дрейфовая длина электронов до 1 см;
- удельное сопротивление SI-GaAs до $3 \cdot 10^9$ Ом*см;
- однородным распределением напряжённости электрического поля, $\xi(x)$ по всей толщине чувствительного слоя;
- произведение $\mu\tau > 10^{-4}$ см²/В для электронов.

На основе SI-GaAs<Cr> структур разработаны и методами монокристаллических интегральных схем (МИС) изготовлены многоэлементные (микрорешетчатые и пиксельные) координатные детекторы прямого счёта единичных заряженных частиц и квантов рентгеновского и гамма излучений. Максимальный размер детекторов ограничен диаметром SI-GaAs<Cr> структур, составляющим 3 дюйма и определяется топологией чипов “read-out” электроники, используемых для поканального счёта и воспроизведения информации на мониторе. Например, “flip-chip” сборка SI-GaAs<Cr> детекторов с чипами “Medipix” и “Gaimpix” позволила создать модули цифрового изображения с числом пикселей (768*512) и размером пикселя (55*55) мкм*мкм.

Рассмотрены физические основы транспорта и сбора заряда из ионизационного трека, сформированного регистрируемой частицей либо гамма квантом в микрорешетчатых и пиксельных детекторах на основе SI-GaAs<Cr> структур и результаты их использования в физических экспериментах, медицине и промышленности. Проводится сравнительный анализ характеристик SI-GaAs<Cr>, CdTe и кремниевых детекторов.

13 марта, день 4

Дифракция на порошках: принципы, задачи, тенденции

А.М. Балагуров

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Открытие дифракции рентгеновских лучей кристаллическими телами (1912 год, W.Friedrich, P.Knipping & M.Laue) вошло в список десяти наиболее важных открытий в истории человечества. Основанный на этом открытии метод изучения строения вещества – дифракционный структурный анализ – признан важнейшим экспериментальным методом, применения которого имеют монументальные последствия. Первые структурные работы (1914, W.H.Bragg & W.L.Bragg) были выполнены на монокристаллах, но уже в 1916 году были правильно интерпретированы (P.Debye & P.Scherrer) результаты дифракционных экспериментов на порошках, что привело к созданию нового метода структурных исследований – порошковой дифракции (метод Дебая-Шеррера).

Дифрактограмма поликристаллического материала – интенсивность как функция одной переменной (угла рассеяния, времени пролета, переданного импульса или межплоскостного расстояния) – поражает своей простотой и, в то же время, фундаментальностью содержания. Все возможные характеристики отдельных дифракционных пиков привлекаются к анализу свойств материала: интенсивности пиков дают информацию о его атомной (магнитной) структуре и кристаллографической текстуре, положения пиков – о параметрах элементарной ячейки, ширины (в общем случае – форма) пиков – о его микроструктуре.

Основное содержание лекции – современные тенденции использования коротковолнового излучения для измерения дифракционных картин (дифрактограмм) от поликристаллов, для чего используются два типа электромагнитного излучения – рентгеновское и синхротронное, а также тепловые нейтроны. В соответствии со спецификой Школы акцент в лекции сделан на дифракции нейтронов. Помимо традиционных для такого типа лекций вопросов (история развития, базовые принципы, примеры применения и т.д.), будут затронуты следующие темы: *ab initio* анализ атомной структуры, магнитные структуры, диффузное рассеяние, микроструктура и внутренние напряжения в материалах и изделиях, приложения в фундаментальных исследованиях.

Монокристалльная кристаллография – история успеха, современное состояние и перспективы

Л.А. Асланов

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

Монокристалльной рентгеновской кристаллографии исполнилось сто лет: первый эксперимент Лауэ и первые расшифровки кристаллических структур были сделаны с использованием монокристаллов.

Изначально интенсивности отражений измерялись ионизационной камерой Вильсона, но вскоре они стали регистрироваться фотографической пленкой с последующими измерениями интенсивностей по маркам почернения, а позднее с помощью микроденситометров. Суммирование рядов Фурье выполнялось на штрипсах, впоследствии замененных компьютерами. Рентгеновским камерам РКОП, РГНС, КФОР и прецессионным камерам пришли на смену линейные дифрактометры с точечными детекторами. Их заменили четырехкружные дифрактометры с полным χ -кругом или с открытой к-геометрией, управляемые компьютером. Добавление к ним двумерных детекторов, синхротронного излучения и мощных комплексов программ для расшифровки и уточнения кристаллических структур привело к современному состоянию дел в этой области кристаллографии в том числе в кристаллографии белков, специфичностью которой является трудность кристаллизации протеинов.

Вторым этапом развития монокристалльной кристаллографии можно считать исследования электронных распределений, а третьим – исследования структур несовершенных кристаллов, которое развивалось одновременно еще с одним своеобразным направлением монокристалльной кристаллографии - исследованием структур квазикристаллов. Очень полезной для исследования структур монокристаллов под внешними воздействиями оказалась дифракция нейтронов.

Перспективным направлением исследований в последние годы стали фотокристаллография, исследования структур в алмазных наковальнях под высокими давлениями и изучение структур реальных кристаллов с помощью диффузного рассеяния. Последнее направление требует разработки методов интерпретации картин диффузного рассеяния.

Особой ветвью монокристалльной кристаллографии стали исследования кристаллических структур микроскопических монокристаллов с помощью дифракции электронов.

Основные положения доклада будут проиллюстрированы примерами.

Синхротронные исследования фаз пониженной размерности в жидких кристаллах

Б.И. Островский

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

Дан анализ результатов рентгеновских экспериментов высокого разрешения, выполненных в последние годы для ряда низкоразмерных фаз жидких кристаллов (ЖК). Цель лекции – критический анализ известных теоретических подходов к описанию низкоразмерных фаз ЖК в свете недавних рентгеновских дифракционных исследований.

Основное внимание в докладе уделено двум жидкокристаллическим системам: ЖК эластомерам и гексатическим ЖК. Рентгеновские эксперименты были выполнены на источниках синхротронного излучения PETRA III в DESY (Гамбург, Германия) и NSLS (Brookhaven, США). В ЖК эластомерах случайно распределенные молекулярные шивки накладывают топологические ограничения на полимерные цепи, превращая эластомер в упругую анизотропную трехмерную среду, с аномально малыми модулями сдвига. Эксперименты показывают, что свойства ЖК эластомеров определяются случайно распределенными в них полимерными шивками [1, 2].

Гексатические ЖК представляют собой среды с одномерным трансляционным порядком в направлении нормали к смектическим слоям и ближним позиционным порядком в плоскости слоев. При этом в плоскости слоев наблюдается дальний порядок в ориентации сторон локальных гексагонов – порядок в ориентации связей. Применение формализма углового рентгеновского кросс-корреляционного анализа к измеренным наборам двумерных дифракционных картин позволило определить параметры порядка в ориентации связей в гексатических ЖК [3]. Обнаружено, что корреляционные длины, отвечающие различным гармоникам Фурье разложения ориентационных параметров порядка, возрастают по мере увеличения номера гармоник. Это указывает на сильное взаимодействие порядка в ориентации связей с позиционным порядком в гексатических ЖК.

1. E.P. Obraztsov, A.S. Muresan, B.I. Ostrovskii, W.H. de Jeu, Phys. Rev E 77, 021706 (2008).
2. W.H. de Jeu, B.I. Ostrovskii, D. Kramer, H. Finkelmann, Phys. Rev E 83, 041703 (2011).
3. R. P. Kurta, B. I. Ostrovskii, A. Singer, O.Y. Gorobtsov, A. Shabalin, D. Dzhigaev, O. M. Yefanov, A. V. Zozulya, M. Sprung, and I. A. Vartanyants, , Phys. Rev. E, 88, 044501 (2013).

Самоорганизованные серебряные наноструктуры в пористой матрице диоксида кремния

Е.Ю. Канюков¹, С.Е. Демьянов¹, А.В. Петров¹, А.К. Литвиновская¹,
V. Sivakov²

¹ Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

² Leibnitz-Institute of Photonic Technology, Jena, Germany

Серебряные наноструктуры сложной формы впервые выращены в пористой матрице диоксида кремния на кремниевой подложке, изготовленной по ионно-трековой технологии. Процесс самоорганизации серебряных наноструктур в ограниченном объеме управляется параметрами безэлектродного химического осаждения, что позволяет формировать широкий ряд объектов с различной формой. Определены режимы роста структур заданной формы. Полученные наноструктуры за счет гигантского усиления комбинационного рассеяния света могут применяться для изучения биологических молекул, а также в качестве (био)-датчиков.

Данное исследование выполнено при поддержке программы Немецкого научного фонда DFG (проект № S11893/2-1) и Европейской программы FP7 (PIRSES-GA-2011-295273-NANEL).

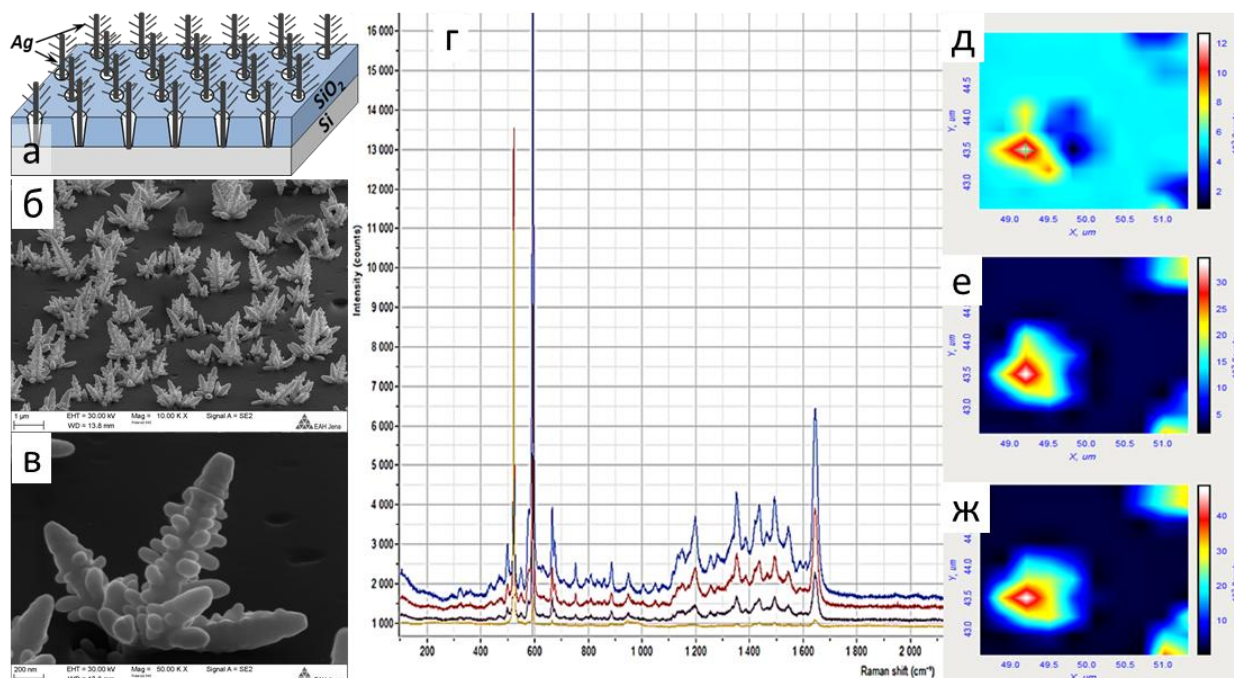


Рис. Серебряные наноструктуры (дендриты) в порах диоксида кремния: схематическое изображение структуры (а); изображения сканирующей электронной микроскопии (б, в). Усиление Рамановского сигнала (лазер с длиной волны 532 нм) 10⁻⁵ М водного раствора Nile blue (C₂₀H₂₀ClN₃O) (z); распределение сигнала комбинационного рассеяния при 520 см⁻¹ (д), 593 см⁻¹ (е) и 1643 см⁻¹ (ж) (сканирование по поверхности 20×20 мкм² с шагом 0,2 мкм)

Синтез декагональных монокристаллов Al-Co-Cu

М.В. Ключева, Д.А. Шулятев, Н.А. Козловская

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

Проведена серия экспериментов по синтезу декагональных объектов системы Al-Co-Cu. Были изучены условия образования монокристаллов стехиометрий $Al_{65}Co_6Cu_{29}$ и $Al_{65}Co_{7.5}Cu_{27.5}$ – из области первичной кристаллизации и $Al_{65}Co_9Cu_{29}$, $Al_{65}Co_{17}Cu_{18}$ и $Al_{65}Co_{18}Cu_{17}$ – из области гомогенности декагональной фазы.

Подобраны оптимальные условия для получения:

- Поликристаллов $Al_{65}Co_6Cu_{29}$ и $Al_{65}Co_{7.5}Cu_{27.5}$. Оптимальная скорость роста для $Al_{65}Co_6Cu_{29}$ составляет 7 град/ч, а для $Al_{65}Co_{7.5}Cu_{27.5}$ – 4 град/ч.
- Монокристаллы требуют предварительного переплава и вырастают длиной до 3 мм. и площадью поперечного сечения порядка 1 мм.² Получены образцы $Al_{65}Co_{7.5}Cu_{27.5}$ (рис. 1), $Al_{65}Co_9Cu_{29}$, $Al_{65}Co_{17}Cu_{18}$ и $Al_{65}Co_{18}Cu_{17}$. Оптимальная скорость охлаждения варьируется от 0.5 до 1.5 град/ч.

Работа поддержана грантом: РФФИ-14-02-01100 А



Рис. 1. Один из монокристаллов Al-Co-Cu, полученный на кафедре ТфиКТ НИТУ МИСиС

Кристаллизация аморфного сплава $Al_{86}Ni_8Sm_6$

Т.В. Куликова, В.А. Быков, А.А. Белозерова

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В данной работе, в качестве объекта исследования был выбран аморфный сплав (лента) $Al_{86}Ni_8Sm_6$ как проявляющий высокую стеклообразующую способность и хорошую термическую стабильность в аморфном состоянии. Исследования выполнены на приборе STA 409 Luxx (NETZSCH) с при разных скоростях нагрева: 2, 4, 8, 10 К/мин

Согласно полученным результатам ДСК обнаружен четырехступенчатый характер процесса кристаллизации в ходе нагрева. Для каждой скорости нагрева были рассчитаны энтальпии кристаллизации всех четырех стадий (таблица 1). Величины теплоты кристаллизации для всех скоростей нагрева (2, 4, 8, 16 К/мин) близки по своим значениям.

Таблица 1. Температуры кристаллизации образце $Al_{86}Ni_8Sm_6$ при разных скоростях

Скорость нагрева, К/мин	T_1, K	T_2, K	T_3, K	T_4, K	$\Delta H_1, Дж/г$	$\Delta H_2, Дж/г$	$\Delta H_3, Дж/г$	$\Delta H_4, Дж/г$
2	180,4	306,3	333,0	383,7	23,5	36,5	34,1	11,1
4	187,7	312,6	342,4	401,0	22,6	38,8	34,7	6,7
8	191,9	319,5	352,3	412,7	37,0	35,5	34,3	18,7
16	199,9	326,6	362,3	425,1	33,9	35,9	34,4	15,5

Термическое поведение образца исследовалось несколько раз при различной скорости нагрева, что дало возможность провести модель-независимую оценку кинетических параметров: энергии активации и предэкспоненциального множителя (таблица 2).

Таблица 2. Кинетические параметры по методу Киссенжера

Образец	$E_1, кДж/моль$	$E_2, кДж/моль$	$E_3, кДж/моль$	$E_4, кДж/моль$	$lg A_1, с^{-1}$	$lg A_2, с^{-1}$	$lg A_3, с^{-1}$	$lg A_4, с^{-1}$
$Ni_8Sm_6Al_{86}$	201	299	219	183	20.4	24.5	16.2	11.6

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-03-31207 мол_a)

Закономерности изменения структуры от условий золь-гель синтеза оксида состава 15мол.%Y₂O₃-60мол.%ZrO₂-25мол.%HfO₂

Н.П. Симоненко¹, Е.П. Симоненко¹, Г.П. Копица², В.Г. Севастьянов¹,
Н.Т. Кузнецов¹

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В связи с нарастающими темпами развития оборонной и гражданской промышленности, связанной с производством материалов с повышенными эксплуатационными характеристиками (стойкость к окислению, термостойкость, прочность), очень актуальной является разработка новых универсальных способов синтеза высокодисперсных тугоплавких оксидов как в виде нанопорошков [1,2], так и в качестве матриц высокотемпературных композиционных материалов [3].

Целью данной работы являлось выявление закономерностей изменения структуры от условий золь-гель синтеза оксида состава 15мол.%Y₂O₃-60мол.%ZrO₂-25мол.%HfO₂, обладающего высокой температурой плавления (около 2750°C) и фазовой стабильностью, с использованием в качестве реагентов ацетилацетонатов соответствующих металлов [4]. Изучен процесс деструктивного замещения C₅H₇O₂-лигандов на OR-группы при термообработке раствора [Zr(C₅H₇O₂)₄], [Hf(C₅H₇O₂)₄] и [Y(C₅H₇O₂)₃] в изоамиловом спирте, определено влияние координационного окружения синтезируемых смешаннолигандных прекурсоров на их гидролитическую активность. С помощью рентгенофазового, совмещённого термического ТГА/ДСК/ДТА анализа и сканирующей электронной микроскопии исследован процесс кристаллизации целевого продукта из ксерогеля при его термообработке в различных условиях. Структура исходного ксерогеля и продуктов его термической обработки в мезоскопическом масштабе (1 ÷ 100 нм) была изучена методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы кристаллитов и удельные поверхности, а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ 14-03-31002 мол_а, 14-03-00983 А.

1. V.G. Sevastyanov, E.P. Simonenko et al., Russ. J. Inorg. Chem. 57, 3 (2012).
2. E.P. Simonenko, N.P. Simonenko et al., Russ. J. Inorg. Chem. 57, 12 (2012).
3. E.P. Simonenko, N.P. Simonenko et al., Composites and Nanostructures. 4 (2011).
4. Н.П. Симоненко, дис. канд. хим. наук, ИОНХ РАН, Москва (2013).

Исследование электронной структуры легированного графена методами фотоэмисионной спектроскопии с угловым разрешением

Н. Вербницкий^{1,2}, А. Федоров^{3,4}

¹ *University of Vienna, Vienna, Austria*

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

³ *IFW Dresden, Dresden, Germany*

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

Графен является монослоем sp^2 -гибридизованных атомов углерода с гексагональной кристаллической решеткой. В настоящий момент данный материал является широко распространенным объектом исследования благодаря своим уникальным свойствам.

В данной работе проведено исследование атомной и электронной структуры “квази-свободного” графена (quasi-free-standing graphene) синтезированного методом CVD на подложках Ni с последующей интеркаляцией монослоя золота. Исследование осуществляли методами дифракции медленных электронов (LEED), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), что позволят детально изучить структуру и электронное энергетическое строение полученных образцов. Исследовано влияние донорного легирования на электронную структуру графена. Донорное легирование осуществлялось напылением атомов щелочных и щелочно-земельных металлов (Li, Na, K, Cs, Rb, Ca). Исследование методом ARPES позволило изучить зонную структуру вблизи точки К зоны Бриллюэна и определить смещения уровня Ферми в результате легирования, величину переноса заряда, а также электрон-фононное взаимодействие.

Допирование одностенных углеродных нанотрубок: новые шаги в понимании эффектов

А.А. Елисеев¹, Л.В. Яшина¹, Н.И. Вербицкий², А.В. Лукашин¹, Н.А. Киселев³

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

² Vienna University, Vienna, Austria

³ Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

В работе изучен процесс формирования, структура и электронное строение нанокомпозитов 1D кристалл@ОСНТ полученных заполнением внутренних каналов одностенных углеродных нанотрубок одномерными кристаллами галогенидов серебра, меди, железа, кобальта, никеля, халькогенидов олова, висмута и галлия и проведено исследование влияния химической природы внедряемых соединений на электронную структуру одностенных углеродных нанотрубок.

Наноконпозиты 1D кристалл@ОСНТ сформированы методами капиллярного внедрения из расплавов и газовой фазы. Структура и электронные свойства композитов исследованы методами электронной микроскопии высокого разрешения и рентгеноспектрального микроанализа, капиллярной конденсации азота при 77 К, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской абсорбционной и рентгеновской флюоресцентной спектроскопии, EXAFS, спектроскопии оптического поглощения, спектроскопии комбинационного рассеяния, а также спектроскопических измерений. Согласно данным ПЭМ высокого разрешения, заполнение нанотрубок приводит к формированию одномерных кристаллов во внутренних каналах ОСНТ. Спектроскопическими методами показано, что взаимодействие между внедренными соединениями и стенками ОСНТ определяется химической природой и кристаллической структурой вводимых материалов, однако не может быть напрямую описано в рамках модели жесткой зонной структуры. В энергетическом спектре композитов установлено появление примесного уровня, что свидетельствует о возникновении химического связывания между нанотрубкой и внедренным нанокристаллом. На основании полученных данных предложена модель взаимодействия между одномерными кристаллами внедренных во внутренние каналы соединений и стенок ОСНТ.

14 марта, день 5

**Исследование взаимодействия наночастиц и нанок капель с
поверхностью, включая силы Казимира, методом ультрахолодных
нейтронов**

*V.V. Nesvizhevsky¹, А.Ю. Воронин², А. Lambrecht³, S. Reynaud³, Е.В. Лычагин⁴,
А.Ю. Музыка⁴, А.В. Стрелков⁴*

¹ *Institut Max von Laue – Paul Langevin, Grenoble, France*

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

³ *Laboratoire Kastler-Brossel, CNRS, ENS, UPMC, Paris, France*

⁴ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Анализируя эксперименты с ультра-холодными нейтронами (УХН), мы показываем, что физическая адсорбция наночастиц/нанок капель, левитирующих в высоковозбуждённых состояниях в глубокой и широкой потенциальной яме, образованной силами Ван-дер-Ваальса/Казимира-Полдера (ВдВ/КП), приводит к новым эффектам на пересечении физики фундаментальных взаимодействий, нейтронов, поверхности и наночастиц.

Учёт взаимодействия УХН с наночастицами позволяет объяснить недавно открытый так называемый малый нагрев УХН в ловушках. Это явление может приносить дополнительные ложные эффекты в эксперименты по измерению времени жизни нейтрона, и существенно для экспериментов с наименьшими заявленными погрешностями. Наконец оно открывает новые уникальные возможности для изучения ВдВ/КП взаимодействий.

1. V.V. Nesvizhevsky, A.Yu. Voronin et al., Crystallography Rep. 58, 743 (2013).
2. V.V. Nesvizhevsky, A.Yu. Voronin et al., New J. Phys. 14, 093053 (2012).

Метаматериалы на основе сверхпроводников

Н.Е. Савицкая

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Метаматериалами называют искусственно созданные из макроскопических «атомов» материалы, которые не только наследуют свойства составляющих их элементов, но и демонстрируют новые физические свойства, возникающие как результат определенного расположения и взаимодействия составляющих метаматериал «атомов». Термин «метаматериалы» особенно часто применяют по отношению к композитам, которые демонстрируют свойства, нехарактерные для объектов, встречающихся в природе. **Сверхпроводящие метаматериалы** – это метаматериалы, в которых в качестве «атомов» выступают сверхпроводящие элементы, например, джозефсоновские контакты, СКВИДы. Благодаря своим уникальным свойствам, такие системы интересны не только с академической точки зрения, но и, более всего, как перспективные материалы для создания уникальных систем безопасности, медицинского оборудования, астрофизических приборов, объектов космической индустрии. Чем же так замечательны сверхпроводящие метаматериалы? Это вы и узнаете на лекции, в ходе которой планируется осветить следующие вопросы:

- что такое метаматериалы и зачем их создают?
- что такое сверхпроводящий метаматериал?
- благодаря каким физическим свойствам сверхпроводящие объекты так интересны в плане создания метаматериалов?
- каковы возможные применения сверхпроводящих метаматериалов?
- что такое Т-лучи и почему так важно освоить «терагерцовый провал»?
- можно ли сшить шапку-невидимку из сверхпроводящего метаматериала?
- какие проблемы, связанные с созданием и исследованием сверхпроводящих метаматериалов еще ждут своего решения?

Молекулярные машины: что это такое и как их делать

В.А. Аветисов

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

Живая природа дает нам множество впечатляющих примеров *молекулярной сборки*, которая осуществляется "молекулярными машинами", способными манипулировать одиночными атомами и молекулами. Понятно, что для осуществления точных операций масштаб манипулятора должен быть соизмерим с масштабом объекта, а это значит, что устройство, осуществляющее молекулярную сборку, обязано иметь субмикронные размеры. По этой причине молекулярные машины называют еще "нано-машинами" или "нано-роботами". В известном смысле, живая клетка – это "фабрика", на которой нано-машины собирают нано-машины. Практически все функционально активные белки, например, являются нано-машинами.

Можно ли делать искусственные молекулярные машины, используя биологические молекулярные машины, как прототипы? Вот тут выясняется, что конструкции биологических молекулярных машин так тонко подогнаны под технологию их производства в живой клетке, что для создания аналогов нужна вся эта технология, а значит и биологические нано-машины. Поэтому если это делается, то это делается с помощью биотехнологий и методов геной инженерии. Что же касается вопроса о том, можно ли сделать нано-машину путем *самосборки*, то он остается пока открытым. Помимо всяческих практических приложений, он представляется важным для понимания того, откуда взялись сами биологические молекулярные машины.

Машину можно понимать как динамическую систему, преобразующую энергию возмущения быстрых степеней свободы в механическое движение вдоль одной-двух медленных степеней свободы. В лекции будет рассказано о том, как формализовать такое определение, построить математическую модель машины, применить ее к биологическим молекулярным машинам, и убедиться в том, что они действительно имеют характерные для машины динамические свойства [1]. Помимо этого, будет рассказано об особых полимерных глобулах, называемых фрактальными (складчатыми) глобулами. Они могут получаться в результате коллапса полимерной цепи и, как выяснилось, имеют те же динамические свойства, что и биологические молекулярные машины [2].

1. Yu. Togashi, A. S. Mikhailov, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **104**, 8697 (2007).
2. В. А. Аветисов, В. А. Иванов, Д. А. Мешков., С. К. Нечаев, ЖЭТФ, 98(4), 270 (2013); arXiv:1303.3898.

Новости с озера Восток в Антарктиде

С.А. Булат

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Будет дан обзор подледникового озера Восток (история открытия, бурение и известные биогеохимические данные по результатам анализа керна льда Восток), рассмотрены возможности экстремальной подледниковой среды озера Восток (Восточная Антарктида) в плане поддержания микробной жизни и выведена предварительная оценка биогеохимического потенциала озера.

Будут обобщены результаты молекулярно-микробиологического анализа поверхностного снега в районе станции Восток и по направлению к береговой черте, а также образцов атмосферного и, главное, озерного льда (медленное природное замерзание) керна Восток, полученные за последние 10 лет. Впервые будут приведены результаты исследования образцов озерной воды, намерзшей на буровую коронку при проникновении в озеро (5 февраля 2012 г.) – так называемая *drill-bit water*, а также образцов воды, замерзшей в буровой скважине после подъема озерной воды и разбуренной в сезон 2012-2013 гг. – *borehole water*. В заключение, будут сообщены планы по комплексному исследованию водной толщи озера методами филогенетики (метагеномики) и биофизики на ближайшие 10 лет в астробиологическом контексте.

1. Lukin V. and S. Bulat. Vostok subglacial lake: Details of Russian plans/activities for drilling and sampling. Ch. 11, In Antarctic Subglacial Aquatic Environments (eds M.J. Siegert, M.C. Kennicutt II, R.A. Bindschadler), Geophysical Monograph Series, 2011, vol. 192, P. 187-197.
2. Bulat S., J-R. Petit. Vostok, Subglacial Lake. In Encyclopedia of Astrobiology, Editor-in-chief: Gargaud, Muriel, eds. Amils, R.; Cernicharo Quintanilla, J.; Cleaves II, H.J.; Irvine, W.M.; Pinti, D.; Viso, M., 1st Edition., 2011, XLIV, 1851 p., 3 volumes, ISBN 978-3-642-11271-3, Springer-Verlag GmbH Berlin Heidelberg, pp 1754-1758.
3. Липенков В.Я., Лукин В.В., Булат С.А., Васильев Н.И., Екайкин А.А., Лейченко Г.Л., Масолов В.Н., Попов С.В., Саватюгин Л.М., Саламатин А.Н., Ю.А. Шибяев. 2011. Итоги исследования подледникового озера Восток в период МПГ. Полярная криосфера и воды суши, М.-Санкт-Петербург: Paulsen, 2011. С. 17-47. ISBN 978-5-98797-044-7
4. Bulat S.A., Marie D., J.R. Petit. Prospects for life in the subglacial Lake Vostok, East Antarctica. Лед и Снег, 2012, Т. 4, Вып. 120: 92-96

Доклады заседания рабочих групп по созданию приборной базы реактора ПИК

Дифрактометр поляризованных нейтронов ЦКП «НИКС»

И.А. Зобкало, С.В. Гаврилов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Дифрактометр поляризованных нейтронов расположен на пучке N 6 реактора ВВР-М Петербургского института ядерной физики НИЦ КИ. Дифрактометр предназначен для изучения особенностей магнитного упорядочения, магнитных фазовых диаграмм в кристаллах. Использование XYZ-поляризационного анализа позволяет достоверно определить детали магнитной фазовой диаграммы кристаллов, описание которых с помощью других методик либо неоднозначно, либо требует долговременных скрупулезных расчетов.

Описание установки. Пучок нейтронов, выходящий из реактора, поляризуется пятиметровым нейтроноводом, созданным на основе суперзеркал Fe-Co. Из нейтроновода нейтроны попадают в магнитное поле радиочастотного флиппера, затем – в магнитное поле узла образца. Система ведущих полей узла образца позволяет ориентировать магнитный момент падающих на образец нейтронов в любом направлении. В режиме измерений с анализом поляризации монокристалл Гейслера Cu_2MnAl используется как монохроматор и анализатор одновременно.

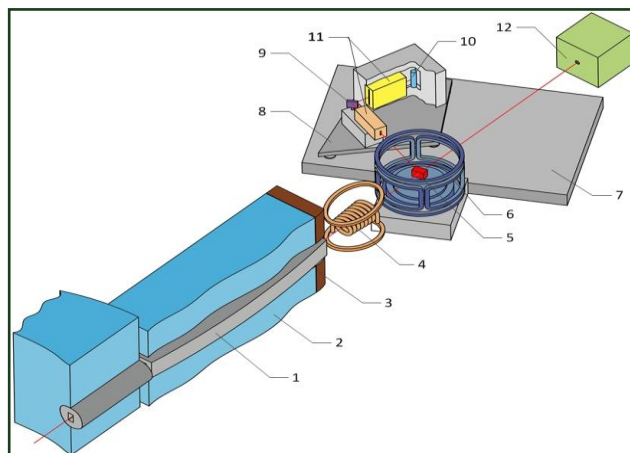


Рис. 1. Схема дифрактометра

Использование методики XYZ-поляризационного анализа в недавних экспериментах на NdMn_2O_5 позволило снять неопределенность, возникшую в результате экспериментов на неполяризованных нейтронах. Было показано, что при температурах 20К и 6К происходят магнитные ориентационные переходы, в то время как в температурной зависимости векторов магнитной структуры при этих температурах никаких особенностей нет [1].

1. I.A. Zobkalo, S.V. Gavrilov, N.Z. SawNyí, S.N. Barilo, S.V. Shiryaev. Magnetic ordering in NdMn_2O_5 studied by the neutron diffraction. J. Magn. Magn.Mater.354, 85-89, 2014.

Малоугловой дифрактометр поляризованных нейтронов «Вектор»

В.В. Рунов, Г.П. Копица, А.В. Ковалев, М.К. Рунова

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Дифрактометр малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов «Вектор» расположен на пучке № 4 реактора ВВР-М Петербургского института ядерной физики НИЦ КИ. Установка предназначена для исследований спиновых корреляций и мезоскопических структур масштаба $4 \div 100$ нм, и спиновой динамики при малых переданных импульсах. Основные исследования ведутся в области физики сложных магнитных структур, спиновых корреляций при критических явлениях в ферромагнетиках, физике сверхпроводников, материаловедении, а также технологии наноструктур и наноматериалов.

Установка входит в перечень уникальных установок России.

Описание установки. Первичный пучок нейтронов формируется двумя стальными коллиматорами (1) и зеркальным фильтром (2) в канале реактора в виде сборки пластин монокристалла Si с покрытием из ^{58}Ni . Для поляризации и монохроматизации отфильтрованного пучка тепловых нейтронов используется магнитный монохроматор (3), работа которого основана на явлении пространственного спинового резонанса в постоянных во времени магнитных полях. Монохроматор позволяет получать пучок нейтронов с поляризацией $P_0 = 95\%$, а также изменять длину волны нейтронов от 0.7 до 1.2 нм и ширину спектральной линии от 10 до 25%. Установка работает в щелевой геометрии в диапазоне векторов рассеяния $3 \cdot 10^{-2} < q < 3 \text{ нм}^{-1}$. Рассеянные на образце нейтроны регистрируются 2-х координатным позиционно-чувствительным ^3He детектором (12). Непосредственно перед детектором установлен суперзеркальный анализатор поляризации (11) с эффективностью 92%.

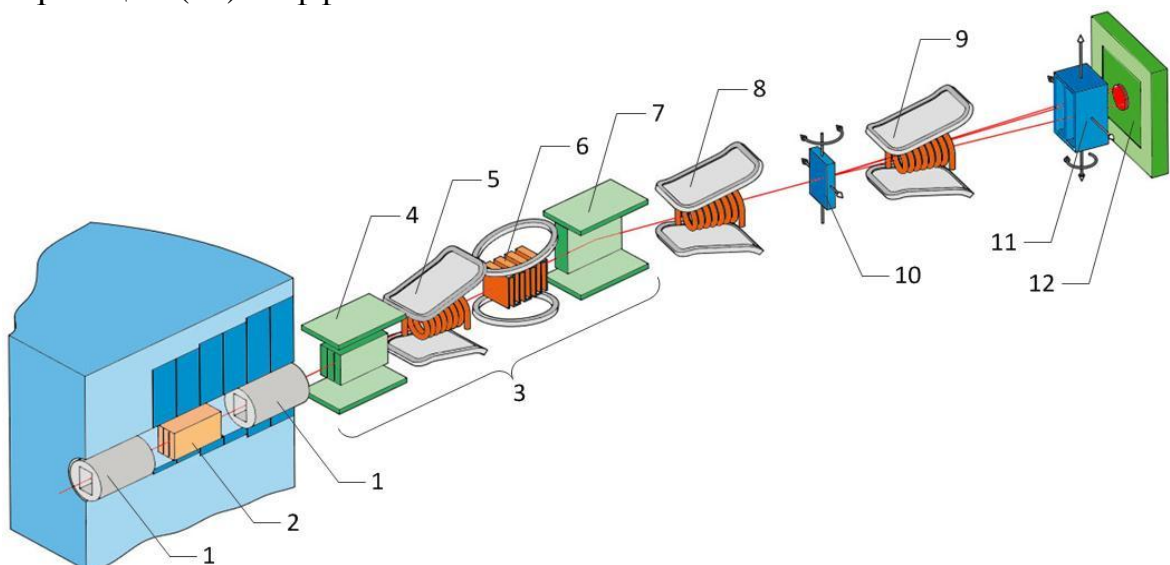


Рис. 1. Малоугловой дифрактометр поляризованных нейтронов «Вектор»

Таблица 1. Основные параметры малоуглового дифрактометра «Вектор»

Характеристика	Значение
Диапазон длин волн	$\lambda = 0.7 \div 1.2$ нм ($\Delta\lambda/\lambda = 10 \div 25\%$)
Диапазон векторов рассеяния	$3 \cdot 10^{-2} < q < 3$ нм ⁻¹
Плотность потока нейтронов на образце	$1,7 \cdot 10^4$ н·см ⁻² ·с ⁻¹ при $\lambda = 0.9$ нм и $\Delta\lambda/\lambda = 25\%$
Поляризация падающих на образец нейтронов P_0	95%

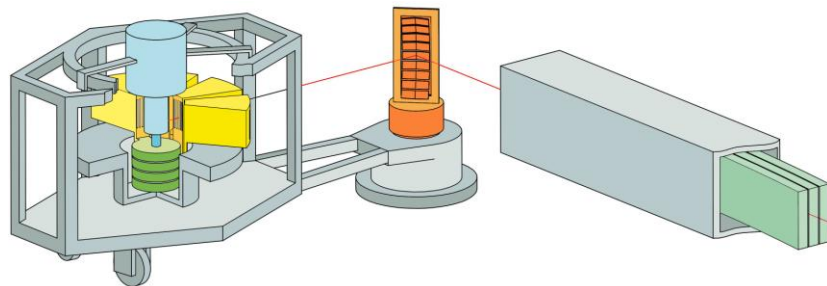
Проведенная модернизация установки позволяет выполнять измерения малоуглового рассеяния с поляризованными нейтронами на современном уровне по импульсному разрешению. В частности, позволяет исследовать слабые ферромагнитные корреляции в немагнитных матрицах [1,2], обусловленные примесями и вакансиями, и магнитно-ядерные контрастирующие области в магнитных материалах [3] методом магнитно-ядерной интерференции в малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов с анализом поляризации в прошедшем нейтронном пучке.

1. В. В. Рунов, Д. С. Ильин, М. К. Рунова, А.К. Раджабов. Письма в ЖЭТФ 95(9) 2012, 530.
2. В. В. Рунов, В. Н. Скоробогатых, М. К. Рунова, В. В. Сумин. ФТТ 56(1) 2014, 68.
3. В.В. Рунов, Ю.П. Чернинков, М.К. Рунова и др. ЖЭТФ 129(1) 2006, 117.

Секционный суперпозиционный порошковый дифрактометр (SSPD)

Р.П. Дмитриев, А.И. Курбаков, А.Л. Малышев, А.Е. Соколов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия



Порошковая нейтронная дифракция традиционно является ключевой методикой в исследованиях по физике конденсированного состояния и практически не имеет ограничений в выборе объектов изучения. Дифрактометр SSPD, с достаточно высоким разрешением ($\Delta d/d_{\min} \approx 3 \times 10^{-3}$) и, вместе с тем, неплохой светосилой предназначен для исследования кристаллических и магнитных структур и их температурной эволюции у объектов с параметром элементарной ячейки в несколько ангстрем, т.е. подавляющего большинства неорганических материалов.

Падающий на образец нейтронный пучок формируется фокусирующим монохроматором. Собственно дифрактометр состоит из 4 независимых секций, содержащих по 12 нейтронных счетчиков с соллеровскими коллиматорами. Секции пошагово двигаются по кругу с исследуемым образцом в центре. Оригинальная конструкция дифрактометра позволяет осуществить суперпозиционный режим измерения: каждая точка нейтронограммы измеряется каждым нейтронным счетчиком и результаты суммируются, благодаря чему эффективно нивелируются неизбежные погрешности детекторной системы. Температурное оборудование позволяет проводить исследования в диапазоне от гелиевой температуры до 800°C.

В качестве основных объектов, актуальных для исследования на SSPD в настоящий момент, отметим материалы с уникальными физическими свойствами: магнетики, проявляющие колоссальное магнитное сопротивление и гигантский магнитокалориметрический и емкостной эффекты; мультиферроики; суперионики; сложные оксиды, теллулаты, антимонаты, титанаты, ниобаты, танталаты, манганиты, кобальтиты; твердые растворы, принадлежащие рядом фаз Раддлесдена-Поппера, фаз Диона-Якобсона и фаз Ауривиллиуса с полным или частичным катионным упорядочением; материалы, применяемые в технологиях производства металлов и сплавов со специальными свойствами, создания композиционных и керамических материалов, материалов для электронной компонентной базы, спинтроники.

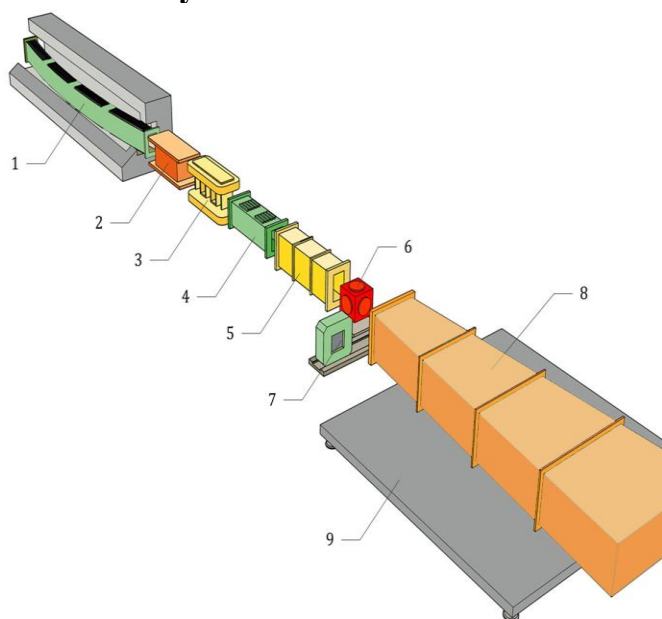
Малоугловой дифрактометр «Мембрана» ЦКП

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

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Малоугловой дифрактометр «Мембрана» на горизонтальном канале № 5 реактора ВВР-М Петербургского института ядерной физики НИЦ КИ для изучения синтетических и биополимеров, молекулярных комплексов, координационных соединений; фуллеренов, нанотрубок, наноалмазов, графенов и др. углеродных структур и их производных; немагнитных и магнитных коллоидов (феррожидкости), мицелл поверхностно-активных веществ; катализаторов, материалов водородной энергетики, композитов с наночастицами, полимерных мембран; дефектов (радиационные, коррозионные, механические), микрофазных включений в кристаллических и аморфных материалах (проблемы диагностики, изучения старения и разрушения материалов ядерных установок и др. промышленного оборудования).

Описание установки



Пучок формируется нейтронотом (1), монохроматором с флиппером (2), резонатором Драбкина (3), анализатором (4). Нейтроны проходят через вакуумный объем (5) на образец (6), рассеяние от которого регистрируют 2D- и линейный детектор (7,8) в сборке с вакуумным объемом (8) на платформе (9).

Детекторы за пределами главного зала - в условиях предельно низкого фона (10^{-3} имп./с в счетном канале). Использование нейтронов с длинами волн ~ 0.3 нм на границе теплового и холодного спектров позволяет изучать структуры ~ 100 нм и малые объекты ~ 1 нм [1].

1. Lebedev V.T., Grushko Yu.S., Török Gy., Structure and self-assembly of fullerene-containing molecular systems. // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. 2013. V. 15. ISS. 3-4. P. 193-198.

48-счетчиковый порошковый дифрактометр

О.П. Смирнов, А.А. Куликов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

48-счетчиковый порошковый нейтронный дифрактометр установлен на горизонтальном канале № 1 реактора ВВР-М и принадлежит к классу дифрактометров с многоканальной системой регистрации рассеянных нейтронов. [Голосовский И.В. и др. // Препринт ЛИЯФ, № 1374, 1988г.]

Ответственный: Смирнов Олег Павлович osmirnov@pnpi.spb.ru
канд. физ.-мат. наук т. (81371)46372

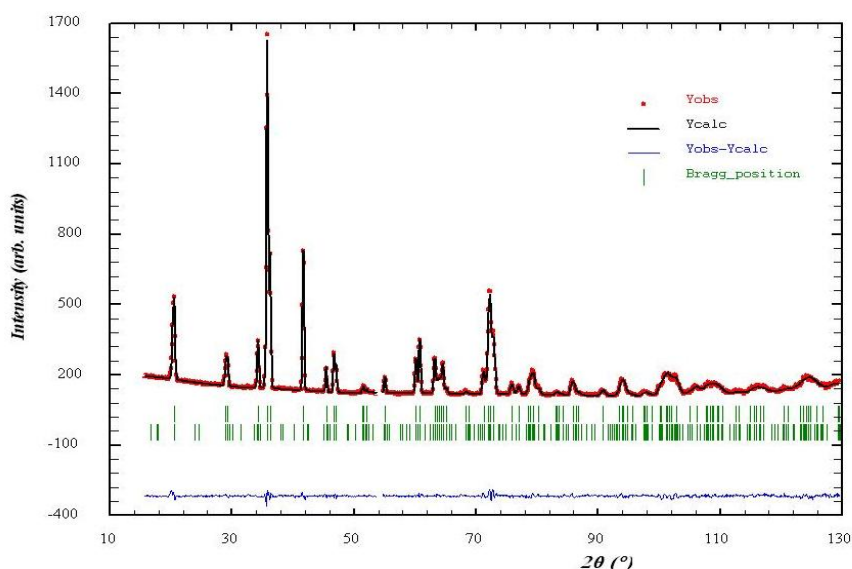
вед. инженер Куликов Александр т. (81371)46416
Аркадьевич

Основные характеристики:

- длины волн нейтронов: 1.38Å, 1.64Å, 2.16Å, 2.52 Å;
- размер пучка на месте образца 10×40 мм²;
- минимальная FWHM 24', разрешение $\Delta d/d \sim 0.01$;
- температурный диапазон образца 1.3-300 К;
- интенсивность нейтронов на образце $I_{\text{обр}} \sim 10^6 \text{ н}^* \text{ см}^{-2} * \text{с}^{-1}$;

На дифрактометре выполнено большое число экспериментальных работ по исследованию магнитных и кристаллических структур ВТСП и родственных им соединений, перовскитоподобных манганитов, обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления:

La_{0.88}MnO_{2.95} (R-3c) T=115.2(1)K



1. А.В. Лазута, В.А. Рыжов, П.Л. Молканов, В.П. Хавронин, Ю.П. Черненко, О.П. Смирнов, И.О.Троянчук, В.А. Хоменко. Фазовые переходы парамагнетик - ферромагнетик и изолятор-металл La_{0.88}MnO_{2.95}. Известия РАН, Серия физическая, т. 75, в.6, стр.1-6 (2012).

Нейтронный рефлектометр НР-4М

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

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

4-х модовый нейтронный рефлектометр НР-4М [1] с горизонтальной плоскостью рассеяния, с двумя спин-флипперами и анализатором поляризации отраженного пучка расположен на пучке № 13 реактора ВВР-М Петербургского института ядерной физики НИЦ КИ. Рефлектометр предназначен для исследования распределения в глубину плотностей длин когерентного ядерного и магнитного нейтронного рассеяния в образцах многослойных наноструктур. Это позволяет изучать не только морфологические и магнитные особенности этих структур (в т.ч. межслойных или приповерхностных областей), но и корреляции между этими особенностями. Уникальность данного нейтронного рефлектометра в его 4-х модовости, т.е. падающий на образец пучок может быть «белым» (имеющим широкое спектральное распределение) неполяризованным, «белым» поляризованным, монохроматическим неполяризованным и монохроматическим поляризованным. Выбор моды зависит от решаемой на нем физической задачи. Существенной особенностью рефлектометра является очень высокая степень поляризации падающего на образец пучка в обеих поляризационных модах.

Описание установки.

Узкий пучок тепловых нейтронов, выйдя из внутриканального коллиматора, отражается от отклоняющего суперзеркала ($m=2$), проходит через фоновый коллиматор, узел формирователя пучка, следует через коллимационную систему двух кадмиевых диафрагм и падает под малым (~ 0.25 градуса) углом на поверхность исследуемого образца. Интенсивность зеркально отраженного от образца и незеркально рассеянного на образце пучка регистрируется детектором. В поляризационных модах используются поляризаторы, два спин-флиппера и суперзеркало CoFe/TiZr ($m=2$) в качестве анализатора поляризации, рассеянного на образце пучка.

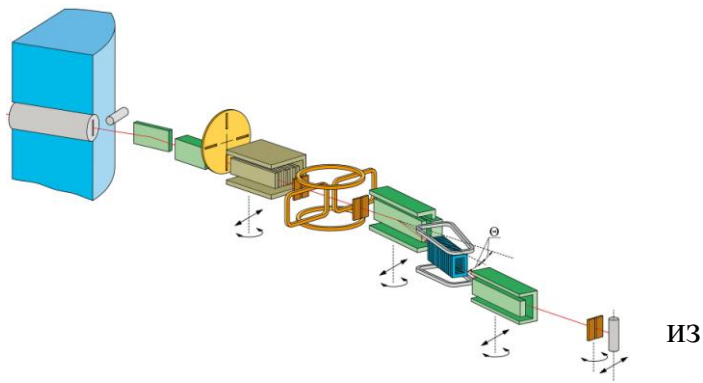


Рис. 1. Схема рефлектометра НР-4М.

Недавно на «белом» поляризованном пучке НР-4М с использованием полного поляризационного анализа было проведено исследование намагниченности бислойной наноструктуры CoCu/Co (GF/F) [2].

1. V.G. Syromyatnikov, N.K. Pleshanov, V.M. Pusenkov, A.F. Schebetov, V.A. Ul'yanov, Ya.A. Kasman, S.I. Khakhalin, M.R. Kolkhidashvili, V.N. Slyusar, A.A. Sumbatyan. Four-modes neutron reflectometer NR-4M. - Preprint PNPI № 2619, Gatchina (2005) p.47.
2. N.K. Pleshanov, V.L. Aksenov, A.P. Bulkin, A.A. Fraerman, V.A. Matveev, Yu. V. Nikitenko, V.G. Syromyatnikov, S.N. Vdovichev, V.M. Uzdin. Study of magnetization of a bilayer nanostructure CoCu/Co (GF/F) by polarized neutron reflectometry. - Journal of Physics: Conference Series 340 (2012) p. 012085 (1-11).

Стендовые доклады

Секция «Нейтронная дифракция»

Нейтронографическая установка для высокого давления "Геркулес" с блоком твердотельных детекторов

С.Н. Аксенов¹, Д.Н. Трунов¹, В.Н. Марьин¹, А. П. Булкин², Р.А. Садыков^{1,3}

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

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

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

В 2010 г. в Институте Ядерных Исследований РАН (г. Троицк) был произведен очередной запуск нейтронного источника ИН-06. В составе созданного нейтронного комплекса на 10-ом канале источника ИН-06 смонтирована нейтронографическая установка «Геркулес», предназначенная для работы под высоким давлением. Установка работает по времяпролетной методике. Установка имеет герметичный сейф, который можно будет заполнять аргоном или другими инертными газами для обеспечения безопасности при работе с водородом или водородосодержащих веществ. Сейф имеет алюминиевые окна, прозрачные для нейтронов. Внутри сейфа установлен пресс, позволяющий получать усилие до 250 тонн, что позволит проводить нейтронографические измерения на образце до 100 кбар, при размерах образца до 1 см³. Для увеличения плотности потока нейтронов, падающих на образец, был установлен концентратор, который благодаря суперзеркалам, фокусирует нейтронный пучок. Суперзеркала имеют многослойное покрытие на основе Ti и Ni и обеспечивают критический угол отражения нейтронов в 2.5 раза больше критического угла Ni (т.е. $m=2.5$). Нейтронный концентратор позволяет увеличить интенсивность падающего на образец потока нейтронов в ~ 3 раза для нейтронов с $\lambda > 2,5 \text{ \AA}$.

В связи с дефицитом H³ было решено перейти на твердотельные детекторы на основе ZnS(Ag)/LiF. В настоящее время на установке «Геркулес» смонтирован сектор с данными счетчиками, позволяющий снимать нейтронограммы под разными углами. Активная площадь детекторов составляет 10x200 мм². Поглотитель нейтронов – сцинтиллятор ZnS(Ag)/LiF с концентрацией лития, обеспечивающей максимальную эффективность регистрации нейтронов. Транспортировка сцинтилляционного света осуществляется с помощью оптических световодов из оргстекла с оптимальной геометрией. Для съема сигнала с детектора используется два пиксельных лавинных фотодиода с активной площадью 3x3 мм², размещенными на торцах оптического световода. Усиление сигнала происходит с помощью зарядочувствительных усилителя со временем формирования 1 мкс. Эффективность регистрации нейтронов не хуже 50%. Максимальная интегральная загрузка составляет не менее 10⁵/с. Временное разрешение данных детекторов не хуже 1 мкс.

Магнитная структура MnGe

*Е.В. Алтынбаев^{1,2}, S.-A. Siegfried³, Н.М. Чубова¹, В.А. Дядькин^{1,4},
Е.В. Москвин^{1,2}, D. Menzel⁵, Ch. Dewhurst⁶, А.В. Цвященко⁷, С.В. Григорьев^{1,2}*

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

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

³ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

⁴ *Swiss-Norwegian Beamlines at the ESRF, Grenoble, France*

⁵ *Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany*

⁶ *Institute Laue-Langevin, Grenoble, France*

⁷ *Институт физики высоких давлений, Троицк, Россия*

Магнитная подсистема соединения MnGe с кубической структурой типа В20 упорядочивается в геликоидальную спиновую структуру с волновым вектором $k = 2.2 \pm 0.05 \text{ нм}^{-1}$ при низких температурах [1,2]. Геликоидальная магнитная структура основана на иерархической системе взаимодействий между спинами. В случае соединений со структурой типа В20 антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского-Мория (DM), обусловленное отсутствием центра симметрии в расположении магнитных атомов, приводит к образованию магнитной спирали [3, 4]. Температурную эволюцию магнитной структуры образца MnGe исследовали методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Одинокый брэгговский пик наблюдается при температурах ниже $T_N = 130 \pm 2 \text{ К}$. Интенсивность магнитного рефлекса медленно растет с ростом температуры вплоть до T_N . Дополнительно к брэгговскому рассеянию растет интенсивность рассеяния на магнитных возбуждениях, которое превалирует над пиком при температурах выше T_N (смотри [5]). При температуре $T_D = 170 \pm 5 \text{ К}$ интенсивность пика от геликоидальной магнитной структуры образца падает до нуля, в то время как профиль интенсивности рассеяния $I(Q)$ хорошо описывается Гауссовой функцией с центром $Q = 0 \text{ нм}^{-1}$. При температурах выше $T_{DM} = 200 \pm 2 \text{ К}$ интенсивность этого рассеяния медленно уменьшается. Подобный профиль рассеяния может быть объяснен Гауссовым распределением магнитных неоднородностей со средним размером большим 70 нм.

Критические температуры $T_N = 130 \pm 2 \text{ К}$, $T_D = 170 \pm 5 \text{ К}$ и $T_{DM} = 200 \pm 2 \text{ К}$ соответствуют точкам перегиба температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ для этого соединения.

Работа поддержана грантом РФФИ № 13-02-01468-А.

1. N. Kanazawa, et al., Phys. Rev. Lett. **106**, 156603 (2011).
2. O.L. Makarova, et al., Phys. Rev. B **85**, 205205 (2012).
3. I.E. Dzyaloshinskii, 1964 Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46** 1420.
4. P.Bak, M.H.Jensen, 1980 J.Phys. **C13** L881.
5. Е.В. Алтынбаев, S.-A. Siegfried, А.Heinemann, G.Simeone, А.В. Цвященко, С.В. Григорьев, Сборник тезисов XLVIII Школы ФКС, 2014, с.51

Спиновые возбуждения геликоидальной магнитной структуры в MnGe

*E.B. Алтынбаев^{1,2}, S.-A. Siegrifrid³, A.Heinemann³, G.Simeone⁴, A.B. Цвященко⁵,
C.B. Григорьев^{1,2}*

¹ Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия

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

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz, Garching, Germany

⁵ Институт физики высоких давлений, Троицк, Россия

Магнитная подсистема соединения MnGe с кубической структурой типа B20 упорядочивается в геликоидальную спиновую структуру с волновым вектором $k = 2.2 \pm 0.05 \text{ нм}^{-1}$ при низких температурах [1, 2]. Эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) показали, что дополнительно к брэгговскому пику с ростом температуры растет аномальное рассеяние при $Q < k$, интенсивность которого не зависит от переданного импульса, и которое превалирует над пиком при температурах выше $T_N = 130 \pm 2 \text{ К}$.

Мы предположили, что аномальное рассеяние обусловлено взаимодействием нейтронов со спиновыми волнами в геликоидальной структуре. Эксперименты на времяпролетном спектрометре нейтронов позволили разделить упругий, неупругий и квазиупругий вклады в рассеяние и подтвердили неупругую природу рассеяния при $Q \leq k$.

В первом приближении энергию спиновых возбуждений в случае $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{k}$ можно представить как $e = A Q \sqrt{Q^2 + k^2}$, а в случае $\mathbf{Q} \perp \mathbf{k}$, как: $e = A Q^2$, где A – жесткость спиновой волны [3]. Таким образом, для случая $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{k}$ и при $Q < k$, возбуждения аналогичны возбуждениям в антиферромагнетике с энергией $\varepsilon \approx A Q k$, а при $Q > k$, энергия возбуждений $\varepsilon \approx A Q^2$, что соответствует возбуждениям в ферромагнетике. В пределе малоуглового рассеяния нейтронов $Q = \sqrt{(\hbar\omega/2E)^2 + \theta^2}$, где $\hbar\omega$ – энергия спинового возбуждения, θ – угол рассеяния, E – энергия нейтрона. Тогда выражение для дисперсии магнонов в терминах переданной энергии $\hbar\omega$ и угла рассеяния θ выглядит следующим образом:

$$\hbar\omega = \pm \sqrt{8\theta_f \left(\theta_0 - \frac{\theta}{2\theta_f} \theta \pm \sqrt{\theta_0^2 - \theta^2} \right)}, \quad \theta_f = \frac{E}{Dk_n^2}, \quad \theta_s = \frac{Dk_s^2}{4E}, \quad \theta_0 = |\theta_f - \theta_s|,$$

где k_n – начальный импульс нейтрона. Профиль интенсивности нейтронного рассеяния на магнонах – это ступенька с обрывом при $Q = k_s$, что и наблюдается в экспериментах малоуглового рассеяния на MnGe.

1. N. Kanazawa, et al., Phys. Rev. Lett. **106**, 156603 (2011).
2. O.L. Makarova, et al., Phys. Rev. B **85**, 205205 (2012).
3. Sergey V. Maleyev Phys. Rev. B, **73** (2006) 174402.

Исследование кристаллической структуры соединения TlFeSe_2

Э.Б. Аскеров^{1,2}, *Р.Н. Мехтиева*², *А.И. Мададзада*^{1,3}, *Д.И. Исмаилов*³,
*А.И. Бескровный*¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт радиационных проблем НАНА, Баку, Азербайджан

³ Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

В данной работе методом нейтронной дифракции изучена кристаллическая структура поликристаллических образцов TlFeSe_2 . Рентгенографический анализ образцов проводился при комнатной температуре на X-Ray Diffractometer (XRD) D2 PHASER (Баку, ИХП НАН Азербайджан) и были рассчитаны параметры кристаллической решетки TlFeSe_2 : $a=11.9758\text{\AA}$, $b=5.4956\text{\AA}$, $c=7.1113\text{\AA}$, $\beta=118.10$. Нейтронные порошковые дифрактограммы были измерены с помощью рассеяние нейтронов на дифрактометре ДН-2, расположенном на импульсном реакторе ИБР-2 (ЛНФ им. И.М.Франка, ОИЯИ, Дубна). Измерения кристаллических образцов проведены нами при температуре 20-300 К. Анализ дифракционных данных производился методом Ритвельда с помощью программы VMRIA и FullProf, с использованием в качестве стартовой модели для расчета профиля нейтронограмм рентгеноструктурных данных. По этим дифракционным отражениям были рассчитаны параметры моноклинной решетки $C2/m$, TlFeSe_2 которые соответствует, $a=11.9742\text{\AA}$, $b=5.4953\text{\AA}$, $c=7.1275\text{\AA}$, $\beta=118.15$. Сравнивая нейтронно-дифракционные спектры, полученные от образцов TlFeSe_2 при температуре 20 К и 300 К, видно, что при температуре 300 К вклад в нейтронограмму дает только ядерное рассеяние. На нейтронограммах, полученных при 20 К наблюдаются дополнительный пик при сохранении общей дифракционной картины.

Мы пришли к выводу, что появление дополнительного пика при низких температурах связано с магнитной структурой TlFeSe_2 . Полученные результаты нейтронографского исследования TlFeSe_2 показывают, что вклад магнитного рассеяния проявляется в появлении дополнительная пика у межплоскостных расстояния $d=4,02\text{\AA}$ $[2\ 1\ -1/2]$ при той же самой кристаллической симметрией, свидетельствует о антиферромагнетизме в данное соединение.

Математический аппарат и программа обработки экспериментальных данных малоуглового рассеяния нейтронов.

А.А. Афонин, С.И. Поташев, Р.А. Садыков

Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

Рассматриваются два подхода при обработке результатов МУРН: макроскопический при больших значениях переданного импульса и квантовомеханический при малых его величинах.

Для макроскопического подхода аналитически вычислены интегралы для расчета интенсивности малоуглового рассеяния в модели полидисперсных шаров. Рассчитана теоретическая зависимость интенсивности рассеяния и ее производной от переданного импульса. Расчет выполняется для комбинации из пяти фракций, которые могут подчиняться трем типам распределений по размерам шаров: распределению Гаусса, Рэлея и Шульца-Зимма и равномерному ограниченному распределению. Представлены алгоритмы подгонки параметров модели: наиболее вероятного радиуса сферы, дисперсии, экспоненциального фактора под экспериментальные значения. Предложены варианты минимизации функции χ^2 с последующим решением системы уравнений и метода поиска минимума на многомерной поверхности в пространстве, измерениями которого являются параметры распределений и их вклады.

Для квантовомеханического подхода аналитически вычислен интеграл функции рассеяния и найдена зависимость интенсивности малоуглового рассеяния от переданного импульса в Борновском приближении на основе теории возмущения. Используется потенциал Юкавы. Предложены варианты минимизации функции χ^2 с последующим решением системы уравнений.

Обсуждается алгоритм сшивки теоретической кривой интенсивности для двух рассматриваемых интервалов переданного импульса.

На основе данного математического аппарата разработана программа расчета интенсивности малоуглового рассеяния в зависимости от переданного импульса, ее производная.

Возможности метода СЭМУРН в исследованиях опалоподобных структур

*Е.В. Величко¹, Ю.О. Четвериков¹, Л.А. Аксельрод¹, В.Н. Забенкин¹,
W.H.Kraan², C.P. Duij², W.G. Bouwman², С.В. Григорьев^{1,3}*

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

² *Delft University of Technology, Delft, The Netherlands.*

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

Использование нейтронного рассеяния в исследованиях структур с линейными размерами от сотни нанометров и больше является перспективной, но трудоемкой задачей. Для классического рассеяния переход к большим масштабам исследуемых структур требует коллимации пучка и, как следствие, потери интенсивности нейтронов. Спин-Эхо Малоугловое рассеяние нейтронов (СЭМУРН) – новый метод определения структуры материалов, который имеет высокое пространственное разрешение и не требует коллимации пучка. Метод основан на явлении Ларморовской прецессии поляризованных нейтронов в магнитном поле. Существенным отличием метода СЭМУРН от традиционного МУРН является то, что СЭМУРН работает в прямом пространстве в диапазоне $z = 10\text{-}10^4$ нм.

Одной из возможностей, открываемых перед экспериментатором методом СЭМУРН является исследование опалоподобных кристаллов. Опалоподобные кристаллы состоят из микросфер, линейные размеры которых лежат в области видимого света. Методом СЭМУРН были исследованы порошкообразные образцы микросфер SiO_2 и сформированные на их основе опалоподобные кристаллы. Из экспериментов по СЭМУРН определены средние диаметры сфер в различных образцах ($D=320, 400, 500$ и 1400 нм) и их дисперсность, которая во всех образцах не превышает 10%. Показано, что методом СЭМУРН измеряются корреляции, обусловленные как формой исследуемых частиц, так и их взаимным расположением. В случае исследования индивидуальных частиц, корреляционная функция СЭМУРН равна единице (при малых z), а затем плавно падает до нуля (при $z > L_{\text{max}}$ – максимальное расстояние внутри частицы), что соответствует автокорреляционной функции. В случае, когда частицы слипаются или образуют кристалл, автокорреляционная функция при z больших диаметра сфер переходит в парную корреляционную функцию и на зависимостях наблюдаются осцилляции, соответствующие координатным сферам в исследуемом кристалле.

Исследование фрактальных и нефрактальных образцов методом Спин-Эхо Малоуглового Рассеяния Нейтронов (СЭМУРН)

Е.В. Величко¹, Ю.О. Четвериков¹, С.Р. Duif², W.G. Bouwman², С.В. Григорьев^{1,3}

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

²*Delft University of Technology, Delft, The Netherlands.*

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

Использование нейтронного рассеяния в исследованиях структур с линейными размерами от сотни нанометров и больше является перспективной, но трудоемкой задачей. Для классического рассеяния переход к большим масштабам исследуемых структур требует коллимации пучка и, как следствие, потери интенсивности нейтронов. Спин-эхо малоугловое рассеяние нейтронов (СЭМУРН) – новый метод определения структуры материалов, который имеет высокое пространственное разрешение и не требует коллимации пучка. Метод основан на явлении Ларморовской прецессии поляризованных нейтронов в магнитном поле. Существенным отличием метода СЭМУРН от традиционного МУРН является то, что СЭМУРН работает в прямом пространстве в диапазоне $z = 10\text{-}10^4$ нм.

В данной работе показана возможность применения метода СЭМУРН к исследованию материалов фрактальной и нефрактальной природы. В качестве объектов исследования были взяты известняк (CaCO_3), активированный уголь (С) и два различных ксерогеля диоксида циркония, приготовленных из растворов различной кислотности (ZrO_2 pH=4 и ZrO_2 pH=9). Все образцы предварительно аттестованы методом ультрамалоуглового рассеяния нейтронов. Впервые предложена и апробирована корреляционная функция СЭМУРН для описания размерности материала:

$$G(z) = (1 - \alpha) + \alpha \left[\exp \left(\left(\frac{z}{\zeta} \right)^{\frac{D-1}{2}} \right) \right],$$

где $G(z)$ – корреляционная функция СЭМУРН, α – чувствительность метода СЭМУРН, z – спин-эхо длина, ζ – корреляционная длина, D – размерность материала.

Образец	Размерность, УМУРН ($2 \cdot 10^{-5} \leq Q \leq 1 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$)	Размерность, СЭМУРН ($10 \leq z \leq 10^4 \text{ нм}$)	Корреляционная длина ζ , мкм
CaCO_3	$D_s = 2 \pm 0.1$	$D_s = 2.1 \pm 0.1$	1.76 ± 0.01
С	$D_s = 2.75 \pm 0.15$	$D_s = 2.75 \pm 0.1$	5.9 ± 0.1
ZrO_2 pH=4	$D_s = 2.03 \pm 0.04$	$D_s = 2.1 \pm 0.1$	8 ± 0.1
ZrO_2 pH=9	$D_s = 2.62 \pm 0.05$	$D_s = 2.3 \pm 0.1$	7.5 ± 0.1

Интерференционные эффекты при дифракции нейтронов на упругих колебаниях совершенной и деформированной кристаллической решетки

В.Н. Гаврилов¹, Э.А. Райтман¹, Д.Э. Мясичев¹, А. Hoser²

¹ *Физико-энергетический институт, Рига, Латвия*

² *Helmholtz Zentrum Berlin, Berlin, Germany*

Исследовались интерференционные эффекты при рассеянии нейтронов на упругих колебаниях совершенной и искаженной кристаллической решетке. В работе приведены следующие экспериментальные данные, полученные впервые.

1) В условиях нейтрон - акустического резонанса в совершенном монокристалле кремния наблюдались биения интенсивности дифракции, контраст которых уменьшался с ростом частоты ультразвука (УЗ).

2) Приведены экспериментальные и теоретические результаты исследования распространения сферической нейтронной волны через толстый образец. Измерялись профили интенсивности дифракции внутри треугольника Бормана. При небольших амплитудах УЗ волны наблюдались пространственные биения пучка рассеянных нейтронов. Для объяснения полученных результатов использована модифицированная динамическая теория рассеяния нейтронов в присутствии УЗ возбуждений. С ростом амплитуды УЗ волны переход к кинематическому режиму рассеяния не наблюдался, несмотря на большие динамические напряжения кристаллической решетки. Это может быть связано с образованием сверхрешетки с периодом стоячей звуковой волны. При больших амплитудах УЗ волны осцилляции интенсивности разрушались. Происходила фокусировка, т.е. резкое сужение и рост интенсивности дифракции в центре пространственного профиля [1]

3) Наблюдалось УЗ разрушение экстинкционных биений Соменкова-Шильштейна уже при небольших амплитудах УЗ. Этот эффект аналогичен подавлению эффекта Бормана в условиях рентген-акустического резонанса [2].

4) В отличие от совершенного кристалла, где с ростом амплитуды ультразвуковой волны наблюдается рост интенсивности дифракции, в изогнутом кремнии интенсивность дифракции резко падает уже при небольших напряжениях на пьезопреобразователе. В деформированном (изогнутом) кристалле при частотах УЗ, превышающих резонансную частоту, наблюдается так называемый “ деформационный” Pendellosung, т.е. осциллирующая зависимость относительной величины спада интенсивности пучка нейтронов от градиента деформации, которая не обнаруживается при резонансных частотах. Экспериментальные результаты находятся в хорошем согласии с теоретическими расчетами.

1. E. Raitman, V. Gavrilov, D. Mjasishchev, A. Hoser, et al. Acta Cryst. (2013). A69, 189–196

2. К.Ассур, И.Энтин ФТТ, (1982),26,2122

Исследование структурных изменений в антисегнетоэлектрике Pb_2MgWO_6 при высоком давлении

С.Г. Джабаров¹, Д. П. Козленко¹, С. Е. Кичанов¹, А. И. Мамедов²,
Р. З. Мехдиева², Е. В. Лукин¹, Б. Н. Савенко¹

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

В последнее время возрос интерес к исследованиям двойных перовскитных соединений с общей формулой $\text{A}_2\text{B}'\text{B}''\text{O}_6$, где А – щелочной, щелочноземельный или редкоземельный ион, а B' и B'' – ионы переходных металлов. Одним из уникальных явлений, наблюдаемым в ряде двойных перовскитных оксидов, является кристаллографическое упорядочение катионов B' и B'' . Степень упорядочения этих катионов существенно влияет как на физические свойства двойных перовскитных соединений, так и на природу происходящих в них структурных и сегнетоэлектрических фазовых переходов. В соединении вольфрамата магния свинца Pb_2MgWO_6 , наблюдается полное упорядочение катионов Mg^{2+} и W^{6+} из-за значительной разницы их зарядов и ионных радиусов. Кроме этого, обнаружен незначительный вклад в механизм формирования антисегнетоэлектрического состояния от дополнительного упорядочения атомов свинца и кислорода.

В нашей работе исследовалась кристаллическая структура Pb_2MgWO_6 методом нейтронной дифракции (ИБР-2, ОИЯИ, Дубна) при давлениях 0-4 ГПа. Результаты настоящей работы показывают, что при воздействии высокого давления в двойном перовските Pb_2MgWO_6 происходит структурный фазовый переход из орторомбической антисегнетоэлектрической фазы симметрии $Pnma$ в кубическую параэлектрическую фазу симметрии $Fm\bar{3}m$. В результате фазового перехода происходит значительное уменьшение среднего значения межатомного расстояния Pb-O примерно на 30 %, при этом средние значения межатомных расстояний Mg-O и W-O изменяются значительно меньше – величина $\langle\text{Mg-O}\rangle$ уменьшается на 4 %, а величина $\langle\text{W-O}\rangle$ увеличивается на 1.5 %, соответственно. Такой характер структурных изменений связан с тем, что появление антисегнетоэлектрического состояния в орторомбической фазе Pb_2MgWO_6 в основном обусловлено смещениями атомов свинца из centrosymmetric позиций и это смещения исчезают в параэлектрической кубической фазе. Объемный коэффициент теплового расширения антисегнетоэлектрической фазы значительно больше по сравнению с параэлектрической фазой.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 14-02-00948-а и № № 12-02-00794-а

Поляризация нейтронных пучков зеркалами

Чжоу Зо Лин¹, В.Г. Сыромятников^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В данном докладе дается обзор получения пучков поляризованных тепловых и холодных нейтронов методом отражения от нейтронных зеркал – многослойных периодических (монокроматоры) и аperiodических (суперзеркала) магнитных наноструктур. Этот метод является одним из самых известных и широко распространенных методов получения поляризованных пучков тепловых и холодных нейтронов. Зеркальные поляризаторы дают большую интенсивность пучка по сравнению с кристаллическими поляризаторами, главным образом за счет широкого спектра отраженного пучка и большого коэффициента отражения.

В докладе рассказывается о процессе развития и принципах работы нейтронных магнитных многослойных поляризаторов-монокроматоров и поляризирующих суперзеркал.

Эволюция магнитной структуры NdMn_2O_5 : исследование методами дифракции нейтронов

М.Д. Кучугура^{1,2}, С.В. Гаврилов¹, И.А. Зобкало¹

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

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

Среди магнитных мультиферроиков, в которых сегнетоэлектричество развивается вследствие магнитного упорядочения, семейство редкоземельных манганатов RMn_2O_5 привлекает особое внимание. Эти соединения демонстрируют наиболее впечатляющие примеры связи между магнитными и электрическими свойствами. Экспериментальные доказательства взаимосвязи между магнитными и электрическими свойствами в этих соединениях, позволяют надеяться на их потенциальные применения для функциональных устройств.

Для объяснения взаимосвязи магнитного и сегнетоэлектрического порядков в RMn_2O_5 был предложен ряд теоретических моделей. Однако ни одна из них не дает полного согласия с наблюдаемыми экспериментальными фактами.

Необходимо отметить, что соединения RMn_2O_5 с размером редкоземельного иона больше, чем у Nd^{3+} (включительно) не являются сегнетоэлектриками. Это обстоятельство может быть полезно в понимании возможного микроскопического механизма, приводящего к мультиферроидности в RMn_2O_5 .

Выполнены исследования монокристаллического NdMn_2O_5 методами нейтронной дифракции, включая дифракцию поляризованных нейтронов, а также поляризационный анализ. Результаты экспериментов свидетельствуют о том, что в магнитная фазовая диаграмма NdMn_2O_5 существенно отличается от таковой в мультиферроиках RMn_2O_5 . В NdMn_2O_5 температура перехода в магнитоупорядоченное состояние ниже, чем в изоструктурных мультиферроиках – $T_N = 30\text{K}$ против $40 - 45\text{K}$. Магнитная структура в NdMn_2O_5 описывается двумя сосуществующими несоразмерными векторами $k = (0.5 \ 0 \ k_z)$ во всем температурном диапазоне, в то время как в мультиферроиках RMn_2O_5 в магнитной фазовой диаграмме присутствует соразмерная фаза, которая индуцирует сегнетоэлектрическую фазу.

При понижении температуры ниже T_N наблюдались два ориентационных перехода – при 20K и 6K .

В наших экспериментах также показано, что в NdMn_2O_5 заселенности «правых» и «левых» спиралей равны.

Псевдомагнитное взаимодействие в многократном малоугловом рассеянии нейтронов.

Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов

Институт теоретической и экспериментальной физики НИЦ КИ, Москва, Россия

Важным преимуществом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) перед рассеянием синхротронного излучения является наличие у нейтрона спина, что позволяет исследовать магнитные свойства вещества. Однако при построении теории многократного МУРН [1] (теории Мольер) спиновая часть взаимодействия нейтронов с неоднородностями вещества не учитывалась. В обобщении [2,3] теории Мольер для образцов с высокой плотностью неоднородностей, учитывающем корреляции в пространственном расположении рассеивающих центров, также не учитывалось наличие спина нейтрона. В данной работе мы провели анализ многократного МУРН с учетом наличия у нейтрона магнитного момента, что при рассеянии на ядрах со спином приводит к наличию дополнительного слагаемого в выражении для потенциала сильного взаимодействия, зависящего от взаимного направления спинов нейтрона и ядра (псевдомагнитное взаимодействие). Это дает возможность проводить описание экспериментов по многократному малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов на поляризованных мишенях. Для получения поляризованных мишеней используется метод динамической поляризации, что дает возможность варьирования контраста и существенного увеличения разрешающей способности метода МУРН [4].

При построении теории амплитуда рассеяния выбирается в приближении эйконала. В данном случае решение выражается через упорядоченную экспоненту вдоль классической траектории (типа Т-экспоненты). Поэтому, в отличие от [2], решение не представимо в квадратурах, и для получения наблюдаемых следствий мы построили кинетическое уравнение, справедливое в главном порядке для рассеяния на одном рассеивающем центре. При коллинеарной ориентации начальной поляризации нейтронов и ядер спиновая часть рассеяния нейтронов определяется средней величиной псевдомагнитного ядерного поля, а флуктуации поля приводят к деполаризации нейтронов.

1. С.В Малеев., Б.П. Топерверг, ЖЭТФ 78, 315 (1980).
2. Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов, Письма в ЖЭТФ 72, 518 (2000).
3. Абов Ю.Г., Джепаров Ф.С., Елютин Н.О., Львов Д.В., Тюлюсов А.Н., ЖЭТФ 143, 507 (2013).
4. В. van den Brandt, H. Glaetli et al., J. Appl. Cryst. 40, 106 (2007).

Исследование перемагничивания инвертированной опалоподобной структуры при приложении поля перпендикулярно плоскости образца методом малоугловой дифракции нейтронов

*А.А. Мистоное^{1,4}, И.С. Шишкин^{1,4}, И.С. Дубицкий^{1,4}, Н.А. Григорьева¹,
А. Heinemann², Н.А. Саполетова³, К.С. Напольский³, С.В. Григорьев^{1,4}*

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

² Технический университет Мюнхена, Гархинг, Германия

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

⁴ Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия

В работе исследована эволюция распределения намагниченности инвертированных опалоподобных структур (ИОПС) на основе кобальта с изменением внешнего магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости образца. ИОПС были синтезированы на основе плёнок полистирольных опалоподобных матриц с ГЦК структурой (постоянная решетки $a_0 \approx 720$ нм), путём заполнения октаэдрических и тетраэдрических пустот кобальтом в поликристаллическом состоянии [1]. Плёнка Co ИОПС, толщиной 13 мкм, также характеризуются ГЦК структурой с ориентацией осей [111] и [-12-1] перпендикулярно и в плоскости подложки, соответственно. Метод малоуглового рассеяния нейтронов был использован для определения направлений векторов локальной намагниченности в ИОПС при приложении поля вдоль оси [111].

Вектора намагниченности в Co ИОПС имеют неоднородное пространственное распределение и преимущественно ориентируются вдоль 4 направлений типа $\langle 111 \rangle$ ГЦК структуры. На основе этих данных была построена модель распределения намагниченности в ИОПС на различных этапах намагничивания. При этом, предполагается, что на каждом этапе магнитная энергия образца минимизируется в соответствии с величиной и направлением поля, а также «правилом льда» для магнитных наносистем. Это правило сформулировано следующим образом: число вошедших в структурный элемент векторов локальной намагниченности должно быть равно числу вышедших. Переход из одного состояния в другой происходит путём переориентации этих векторов, причём скачкообразно при некоторых (критических) значениях величины поля. Однако в такой геометрии при некотором поле «правило льда» нарушается, что приводит к накоплению или разряжению магнитного потока в структурных элементах образца. Характерными особенностями экспериментальных зависимостей магнитной интенсивности нейтронного рассеяния от величины поля являются скачки при $H = 0.6$ Тл и 0.8 Тл, а также существенный гистерезис при $H < 0.6$ Тл.

1. С.В. Григорьев, Н.А. Григорьева, А.В. Сыромятников, К.С. Напольский, А.А. Елисеев, А.В. Лукашин, Ю.Д. Третьяков, Х. Эккерлебе, Письма в ЖЭТФ, т. 37(1), С.15-21, 2008.

Изучение межчастичного взаимодействия в полярной феррожидкости с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов

*А.В.Нагорный^{1,2}, В.И.Петренко^{1,2}, О.И.Иваньков^{1,2}, О.В.Томчук^{1,2},
М.В.Авдеев¹, Л.А.Булавин², L.Vekas³*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Center for Advanced and Fundamental Technical Research, Timisoara, Romania

Особый класс коллоидных систем представляют магнитные жидкости (МЖ), или феррожидкости, агрегационная устойчивость которых обеспечивается наличием стабилизационной оболочки, преимущественно, с молекул поверхностно-активных веществ на поверхности магнитных частиц. Благодаря этому МЖ демонстрируют отличную коллоидную стабильность, что делает возможным их практическое применение в разных технических и, в особенности полярных МЖ, биологических целях [1-3]. Одним из основных направлений исследования МЖ является изучение влияния разных факторов на стабильность коллоидов. Магнитные частицы обладают значительной полидисперсностью, что наряду с анизотропным диполь-дипольным взаимодействием их магнитных моментов сильно усложняет изучение свойств реальных МЖ.

В работе представлены результаты исследований структуры и оценки межчастичного взаимодействия полярной феррожидкости магнетит / олеиновая и додецил-бензолсульфоновая кислоты / изобутанол при различном содержании магнитного материала, полученные методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Показано, что экспериментальные МУРН кривые отлично описываются форм-фактором полидисперсных сферических частиц для концентраций магнетита ~ 0.5 об %. Для больших концентраций магнитного материала в объёме МЖ было обнаружено значительное влияние структурного фактора на спектры МУРН. По экспериментальным данным МУРН получены зависимости эффективного структурного фактора, а также приведено сравнение с теоретической зависимостью, рассчитанной для потенциала твёрдых сфер в полидисперсном приближении.

1. V.Berkovski. Magnetic Fluids and Applications Handbook (Beggel House Inc.: N.-Y.) (1996) 350.
2. Y.Iwamoto, H.Yamaguchi, X.-D. Niu. J. Mag. Mag. Mater. 323, 1378-1383 (2011).
3. P.Kopcansky, M.Timko, J.Kovac, M.Vaclavikova, S.Odenbach. Journal of Physics: Condensed Matter. 20(20), 200301 (2008).

Исследования закрытой пористости функциональных керамических материалов методом спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов

К.А. Павлов^{1,2}, Е.В. Величко², С.Р. Duif³, W.G. Bouwman³, С.В. Григорьев^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

³ Delft University of Technology, Delft, The Netherlands

Функциональные керамические материалы находят свое применение в различных областях науки и техники: пьезо-, сегнето-, магнетики, термоэлектрики, сверхпроводники, изоляторы, оптическая, а так же, керамические катоды, аноды и электролиты для высокотемпературной электрохимии.

Наличие и строение закрытых пор в функциональных керамических материалах драматически влияет на их физические свойства, такие как хрупкость, плотность, коэффициент термического расширения и проводимость. Определение формы, размеров и взаимного расположения закрытых пор является важной технической задачей.

Метод спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов дает возможность оценить размеры, форму и взаимное расположение пор в объеме керамического материала.

В данной работе исследованы образцы плотноспеченной керамики состава $\text{Bi}_{12.8}\text{Ba}_{0.2}\text{Mo}_5\text{O}_{34\pm\delta}$. Данный материал является многообещающим кислородным проводником. Для исследований подготовлена серия образцов, которые спекались различное время (6, 19, 43 часа) при температуре, близкой к температуре плавления (850°C).

СЭМУРН измерения проводились на установке SESANS Дельфтского Технологического Университета на монохроматическом поляризованном нейтронном пучке с длиной волны нейтронов 2 \AA , степенью немонахроматичности 2% и поляризацией падающего на образец пучка 93%. Результаты эксперимента показали, что в материале присутствуют поры сферической формы, однако их объемная доля не превышает 5%, диаметры пор образца, спекавшегося в течение 6 часов составили $6\pm 0.3 \text{ мкм}$, при увеличении времени спекания до 19 часов, диаметры пор уменьшаются до $5\pm 0.3 \text{ мкм}$ и при дальнейшем спекании не меняются. Объемная доля пор во всех образцах составляет менее 5%.

Из работы можно сделать вывод о применимости метода СЭМУРН для исследований пористости керамических материалов, поскольку он позволяет получать информацию о размере, форме и суммарном объеме пор в объеме керамического образца, не разрушая его. Полученные экспериментальные данные позволят оптимизировать процесс получения плотноспеченной керамики.

Изучение распада мартенсита в ферритно-мартенситных сталях методами нейтронографии и МУРН

И.В. Папушкин¹, В.В. Сумин¹, А. Томчук¹, Д. Торок²

¹ *Объединенный институт ядерной физики, Дубна, Россия*

² *Исследовательский институт физики частиц и ядерной физики ВАН, Будапешт, Венгрия*

В ЛНФ и других институтах проведены измерения дифракции и МУРН на ферритно-мартенситных сталях 10Х9К3В2МФБР и 10Х9МФБР. Для сравнения возможностей разных малоугловых спектрометров эти измерения проведены на спектрометре ЮМО (ОИЯИ) и установке Исследовательского института физики частиц и ядерной физики (Будапешт). В работе приводятся предварительные результаты этих измерений и сравнение с ТЭМ.

Сталь 10Х9К3В2МФБР показала хорошие результаты при длительной теплостойкости примерно на 10% от ранее разработанных сталей этого класса. Это позволяет надеяться на ее использование в тепловых энергоблоках на сверхкритических параметрах ($P=30$ МПа и $T=650$ °С) [1].

Проведено измерение микронапряжений в двух изученных сталях и получены зависимости микронапряжений от температуры отпуска мартенсита. Определенные по этим данным плотности дислокаций сильно отличаются от данных ТЭМ и дальнейшее изучение этого вопроса поможет выяснить причины этого расхождения, которые не обязательно лежат в области рассеяния нейтронов.

Данные МУРН также показали отличие в области статистического изучения процессов выпадения карбидов. Именно при 600 °С данные МУРН показывают основное отличие в процессе выпадения карбидов, которое кардинально меняет физико-механические свойства обеих сталей.

К сожалению, использованные методы рассеяния не позволили выяснить причину положительного влияния кобальта на физические свойства в ферритно-мартенситной стали 10Х9К3В2МФБР.

1. А. Ю. Кипелова, А. Н. Беляков, В. Н. Скоробогатых, И. А. Щенкова, Р. О. Кайбышев. Структурные изменения при отпуске стали 10Х9К3В2МФБР и их влиянии на механические свойства. *Металловедение и термическая обработка металлов*, №3(657), стр. 14-25, (2010).

Магнитное состояние и спиновый транспорт в эпитаксиальных гетероструктурах манганит/рутенат

А.М. Петржик¹, Ю. Хайдуков³, Г.А. Овсянников^{1,2}, А.В. Шадрин^{1,2}

¹ ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия

² Чалмерский технологический университет, Гетеборг, Швеция

³ Институт исследований твёрдых тел общ. Макса Планка, Штутгарт, Германия

Туннельные переходы, состоящие из двух ферромагнитных электродов, разделённых между собой слоем изолятора, интересны возможностью изучения спиновой поляризации носителей, а также практическим применением в энергонезависимой магнитной памяти. Большое туннельное магнитосопротивление (TMR), необходимое для практического использования, возникает тогда, когда внешнее магнитное поле изменяет направление намагниченности приграничного слоя гетероструктуры с AF на FM. TMR, как показывает модель Джульера [1] для двух одинаковых ферромагнетиков, в таком случае определяется только степенью поляризации носителей заряда: $TMR = \frac{2P_1P_2}{1-P_1P_2}$, где P_1 и P_2 – поляризация спинов 1-го и 2-го ферромагнетика.

Методом лазерного распыления изготовлены эпитаксиальные гетероструктуры, состоящие из двух ферромагнетиков, разделённых слоем изолятора: $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3/LaMnO_3/SrRuO_3$ (LSMO/LMO/SRO) на подложках $NdGaO_3$. Толщина слоя LMO, служащего для регулирования связи между двумя ферромагнетиками [2], варьировалась от 0 до 35 нм. Рентгено-структурные исследования на просвечивающем электронном микроскопе показали резкие границы разделов и эпитаксиальный рост всех слоев.

Магнитное состояние гетероструктур исследовалось методами СКВИД-магнитометрии и рефлектометрии поляризованных нейтронов. Обнаружено плоскостное AF упорядочение на границе LSMO/SRO при малых (меньше чем поля насыщения SRO) внешних магнитных полях. При полях более 1кЭ антиферромагнитное упорядочение меняется на ферромагнитное. Магнитосопротивление (MR) уменьшается с увеличением толщины прослойки LMO, однако при толщине прослойки в 13 нм возникает гистерезис по магнитному полю в полях порядка сотен Эрстед. В отсутствие LMO прослойки зависимость $R(H)$ имеет иной вид: наблюдается отрицательное MR, вызванное, предположительно, отрицательной намагниченностью SRO пленки. Гетероструктура с толщиной LMO 13 нм показала сильное различие в (+-) и (-+) спин-флип каналах нейтронной рефлектометрии, причины которого обсуждаются.

Авторы благодарны И.В. Борисенко, К.И. Константиану, В.В. Демидову и Л. Мустафа за помощь в эксперименте и полезные обсуждения. Работа поддержана РАН, РФФИ 14-07-00258, НШ-4871.2014.2 и ЦКП МФТИ.

1. M. Julliere, Phys. Lett. 54A, 225 (1975)

2. M. Ziese, F. Bern, A. Setzer and others., Eur. Phys. J. B 86: 42 (2013)

Spatial distribution of diffracted neutron beam in perfect and strained Si crystal undergoing ultrasonic excitation

V.Gavrilov¹, Ju.Ekmanis¹, D.Mjasishev¹, E.Raitman¹,
A.Hoser², T.Hoffmann², P.Mikula³

¹ Institute of Physical Energetics, Riga, Latvia

² Helmholtz-Zentrum Berlin, Berlin, Germany

³ Nuclear Research Institute, Rez near Prague, Czech Republic

The spatial distribution of neutron beam Bragg diffracted from Si single crystal undergoing on ultrasound excitation and bending have been measured. The values of ultrasound wave amplitude and uniform strain gradient were determined. For the perfect crystal, it was shown that at the same time as the acoustic wave amplitude is increased, the front-face peak position remains unchanged and its value grows linearly. For the strained crystal, the spatial distribution of diffracted neutrons inside the profile is analyzed as well as the mechanism of anomalous decrease of diffraction intensity, depending on acoustic wave's amplitude and on the value of the uniform strain gradient.

New types of *Pendellösung* fringes were observed. These effects observed at the first time, have a different nature in the case of a perfect and deformed crystal. It is supposed that in the perfect crystal this effect may be due to the appearance of the new "sound" extinction length, depending on the amplitude of the ultrasonic wave, thus, it leads to the new interference interactions between neutron wave and ultrasonic phonons. The influence of the crystal bending on the formation of the fringes in Bragg spatial profiles was studied. It is established that within the framework of the dynamical theory of the neutron scattering some asymptotic models valid for the case of Laue geometry can be applied in the case of Bragg geometry also. Good agreement between experimental data and the theory have been obtained.

Определение неоднородных профилей намагниченности Fe и Gd в сверхрешетках Fe/Cr/Gd

*М.В. Рябухина¹, Е.А. Кравцов¹, Д.В. Благодатков¹, Л.И. Наумова¹,
В.В. Проглядо¹, Ю.Н. Хайдуков²*

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт физики твердого тела общ. Макса Планка, Штутгарт, Германия

Известно, что при прямом обменном взаимодействии слоев Fe и Gd их магнитные моменты выстраиваются антипараллельно. В искусственной магнитной системе, состоящей из наноразмерных слоев Fe, Cr и Gd, можно управлять взаимной ориентацией магнитных моментов слоев Fe и Gd, изменяя толщину антиферромагнитного слоя Cr [1]. В настоящей работе мы обсуждаем применение метода поляризационной нейтронной (ПНР) и резонансной рентгеновской магнитной рефлектометрии (РРМР) для определения магнитной структуры внутри тонких ферромагнитных слоев.

Серия сверхрешеток $\text{Fe}(35 \text{ \AA})/\text{Cr}(t)/\text{Gd}(50 \text{ \AA})$, $t = 0 - 60 \text{ \AA}$, была выращена методом магнетронного распыления на подложках (001)Si. Рентгеновские исследования проводились на станции 4-ID-D (APS, ANL), нейтронные – на установке NREX (FRM II). На рисунке 1 представлены спектры ПНР и профиль намагниченности сверхрешетки $[\text{Fe}(35 \text{ \AA})/\text{Cr}(4.4 \text{ \AA})/\text{Gd}(50 \text{ \AA})/\text{Cr}(4.4 \text{ \AA})]_{12}$, полученный при $H=500 \text{ Э}$ и $T=300 \text{ К}$. Из анализа измерений можно сказать, что в слое Gd формируется неоднородное магнитное состояние.

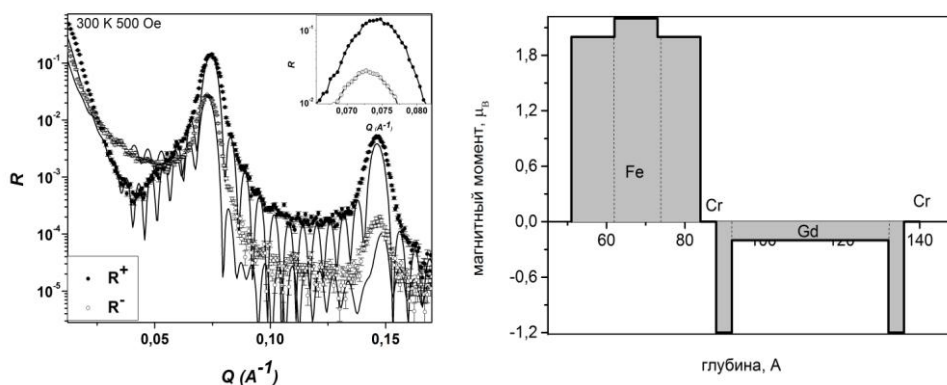


Рис. 1. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) ПНР спектры от сверхрешетки $[\text{Fe}(35 \text{ \AA})/\text{Cr}(4.4 \text{ \AA})/\text{Gd}(50 \text{ \AA})/\text{Cr}(4.4 \text{ \AA})]_{12}$, измеренные при $T=300 \text{ К}$, $H=500 \text{ Э}$ и профиль намагниченности, полученный при $H=500 \text{ Э}$ и $T=300 \text{ К}$.

1. В. Sanyal, С. Antoniак// Phys. Rev. Lett. 2010. №104. 156402.

Камеры фиксированного высокого давления для нейтронографии

Р.А. Садыков¹, А.А. Подлесняк², А.И. Колесников², А.С. Иванов³,
Е.В. Яковенко⁴, Д.В. Шептяков⁵, Т. Страессл⁵

¹ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк, Россия.

² Oak Ridge National Laboratory, (SNS), TN, USA

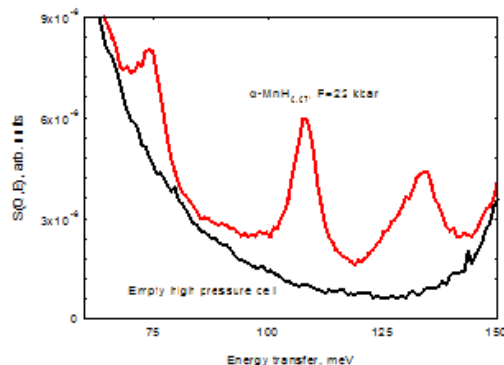
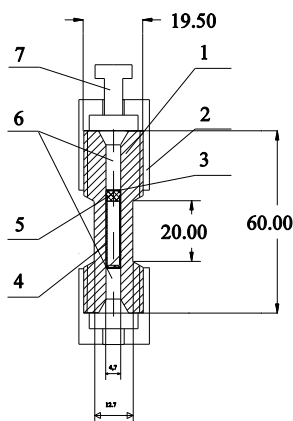
³ Institut Laue-Langevin (ILL), Grenoble, France

⁴ РИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁵ Paul Scherrer Institute, LNS, Villigen, Swiss

Давление такой же равноправный термодинамический параметр (при внешних воздействиях на образец) как температура и сильное магнитное поле.

Повышенный интерес к квантовым критическим явлениям, квантовой фрустрации и состоянию не ферми жидкостного поведения ряда магнетиков, под давлением, вызвало необходимость проведения прямых нейтронографических экспериментов как при низких температурах и в сильных магнитных полях так и при высоком давлении. В связи с этим нами были разработаны и применены ряд оригинальных камер высокого давления (КВД) и в докладе представлены варианты камер. Камеры имеют конструкцию позволяющую помещать их в стандартные нейтронографические криостаты, включая криостаты растворения, криомагниты и использовались на источниках нейтронов: SINQ(Swiss), ISIS(UK), HMI(Germany), ILL(France) и SNS (USA) на приборах высокого разрешения, спектрометрах неупругого рассеяния и дифракции поляризованных нейтронов.



INS spectra of $\alpha\text{-MnH}_{0.07}$ measured at SEQUOIA with $E_f=160$ meV for $P=22$ kbar and empty high pressure cell, all at $T=7$ K.

Один из вариантов КВД и экспериментальные спектры:

1)-Корпус камеры из немагнитного сплава 40ХНЮ, 2)- гайки из немагнитного титанового сплава, 3)- экструзионные кольца из сплава БрБ2, 4)-кювета для образца и 5)- крышка изготовлены из тефлона ,6)-поршни из немагнитного сплава 40ХНЮ, 7)- толкатель. Эта камера немагнитна вплоть до 9.5Т и 1.5К.

1. R. Sadykov, High Pressure for Neutron Scattering at Low Temperature and High Magnetic Field. <http://www.ill.eu/instruments-support/sample-environment/about-us/events/sensf-2008>

Монокристалльные нейтронные дифрактометры HEiDi и POLI на реакторе FRM II

A.П. Сазонов^{1,2}, M. Meven^{1,2}, V. Hutanu^{1,2}, W. Luberstetter^{1,2}, G. Roth¹

¹ RWTH Aachen University, Institute of Crystallography, Aachen, Germany

² JCNS, Forschungszentrum Juelich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany

HEiDi [1] и POLI [2,3] – два монокристалльных дифрактометра располагающихся на пучке горячих нейтронов SR9 реактора FRM II в Гархинге, Германия.

HEiDi – классический четырехкружный дифрактометр, введенный в эксплуатацию в 2005 году и установленный на канале SR9b. Этот инструмент предназначен для детальных исследований кристаллических и магнитных структур неполяризованными нейтронами. Для измерений отличных от комнатной температуры используется криогенный охладитель с замкнутым циклом (2.5 – 300 К) и зеркальная печь (300 – 2000 К). Использование коротких длин волн ($\lambda = 0.55 – 1.17 \text{ \AA}$) делает возможным исследование соединений на основе элементов с высоким сечением поглощения нейтронов (редкоземельные, кадмий и др.), а также позволяет проводить измерения вплоть до $\sin\theta/\lambda \approx 1.5 \text{ \AA}^{-1}$.

POLI – новый монокристалльный дифрактометр, созданный в 2010 году и успешно протестированный на канале и монохроматоре HEiDi. Начиная с 2014 года, POLI располагается на собственном канале SR9a. Этот инструмент был спроектирован для исследования сложных магнитных структур поляризованными нейтронами: как методом трехмерного поляризационного анализа в нулевом магнитном поле с помощью установки CRYOPAD, так и классическим методом измерения флип-отношений во внешних магнитных полях. Возможно применение внешнего электрического поля. Уникальность данного дифрактометра состоит в применении ³He ячеек в качестве, как анализатора, так и поляризатора, что позволяет использовать различные короткие длины волн нейтронов ($\lambda = 0.55 – 1.15 \text{ \AA}$) в сочетании с высоким разрешением.

Примеры использования обоих дифрактометров будут представлены в докладе.

1. M. Meven, V. Hutanu, and G. Heger, Neutron News 18, 19 (2007).
2. V. Hutanu, M. Meven, Leli evre-Berna, and G. Heger, Physica B 404, 2633 (2009).
3. V. Hutanu, M. Meven, S. Masalovich, G. Heger, and G. Roth, J. Phys.: Conf. Ser. 294, 012012 (2011).

Исследование особенностей структуры оксидных нанокластеров церия и титана в силикатном стекле методом малоуглового рассеяния нейтронов

*С.А. Самойленко^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, А.Х. Исламов¹, Д.П. Козленко¹,
А.В. Белушкин¹, В.С. Гурин³, Г.П. Шевченко³, Е.Е. Трусова⁴, Л.А. Булавин²,
Б.Н. Савенко¹*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Киевский национальный университет имени Т. Шевченко, Киев, Украина*

³ *Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь*

⁴ *Белорусский государственный технологический университет, Минск, Беларусь*

Исследования оптических материалов на основе силикатных стекол с допированными в них оксидами переходных и редкоземельных элементов [1] вызывают научный интерес в связи с их возможным использованием в производстве селективных оптических фильтров для лазерной техники с высокой термической и радиационной стойкостью, для изготовления колб автомобильных и сигнальных ламп, а также имитации драгоценных камней [2,3]. Перспективными физическими свойствами и эксплуатационными характеристиками обладают силикатные стекла, допированные оксидами титана и церия [4].

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы особенности формирования сложных оксидных нанокластеров Ce-Ti-O в силикатном стекле. Обнаружено, что в исходной стеклянной матрице без добавления оксидов титана и церия образуются ограниченные области флуктуации плотности материала стекла, которые могут служить центрами нуклеации для оксидных кластеров церия и титана при их введении в матрицу. Рассчитанный средний размер этих неоднородностей не превышает 30(1) нм, а их поверхностный объем составляет 0.72(3) нм³. Предложен структурный механизм формирования оксидных Ce-Ti-O в силикатном стекле, в котором при малых концентрациях исходного оксида церия CeO₂, нанокластеры формируются внутри ограниченной области неоднородностей материала стекла. При больших концентрациях оксида церия, рост оксидных нанокластеров происходит преимущественно на поверхности этих неоднородностей, что приводит к резкому изменению размеров нанокластеров и их фрактальной размерности.

1. С.А. Кутолин, А.И. Нейч, Физическая химия цветного стекла. М:Стройиздат 1988.
2. G. S. Bogdanova, S. L. Antonova and B. F. Dzhurinskii // *Izv. Akad. Nauk SSSR. Neorg. Mater.* 6, 1970. С 943–948.
3. Е.Е. Трусова, Н.М. Бобкова, В.С. Гурин, Г.К. Глушонок. // *Журнал прикладной спектроскопии* т. 76, № 2, 2009. С. 211–217.
4. Е.Е. Трусова, Н.М. Бобкова, В.С. Гурин. // *Стекло и Керамика*. 2009. №7. С. 9-13.

Результаты моделирования и измерения первых спектров на нейтронном рефлектометре-малоугловом спектрометре «Горизонт» на импульсном источнике ИН-06

А.А. Столяров¹, В.С. Литвин¹, Р.А. Садыков¹, В.И. Боднарчук²

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

На импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН смонтирован и испытан времяпролетный нейтронный рефлектометр-малоугловой спектрометр «Горизонт» с вертикальной плоскостью рассеяния, благодаря которой можно исследовать поверхности и границы раздела жидких образцов. Общая тема работы: Монте-Карло-моделирование работы установки.

Основная часть работы состояла в постановке модельного рефлектометрического эксперимента в программе VITESS. Были произведены обработка результатов (в ходе которых было найдено разрешение установки и сверено с теоретически посчитанным) и математические расчеты.

На заключительном этапе была поставлена задача увеличить разрешающую способность рефлектометра при минимальных потерях интенсивности, для чего между выходным окном нейтронновода и первой коллимационной щелью был установлен концентратор. В модельных экспериментах было последовательно использовано 3 усилителя плотности потока (1-ый концентратор целиком изготовлен из стали, 2-ой – из суперзеркала с $m=2$, 3-ий наполовину изготовлен из стали, наполовину из суперзеркала). Для всех трех случаев было найдено разрешение и выбран оптимальный вариант.

Также планируется оснащение рефлектометра газовым нейтронным двухкоординатным детектором, что позволит расширить круг решаемых задач. Детектор прошел испытание на рефлектометре «РЕФЛЕКС» на импульсном реакторе ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна).

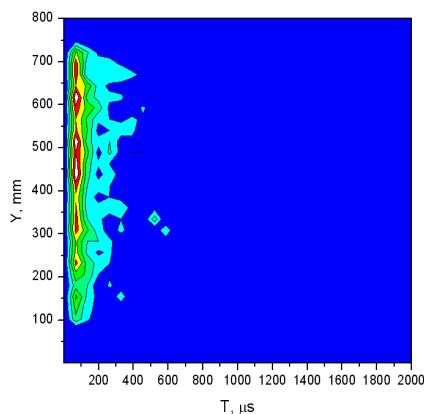


Рис.1. Времяпролетный спектр, полученный с помощью детектора на образце [TiN-WN]x7/Si

Магнитные свойства спиновой структуры гольмий-иттриевых сверхрешёток во внешнем магнитном поле

В.В. Тарнавич¹, D. Lott², А.С. Волегов³, С.В. Григорьев^{1,4}

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

² *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

³ *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

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

Исследованы структурные и магнитные свойства многослойной гольмий-иттриевых сверхрешёток методами СКВИД магнитометрии, рентгеновского и нейтронного рассеяния. Пять образцов с последовательностью слоёв $[\text{Ho}_{45\text{Å}}/\text{Y}_{30\text{Å}}]_{20}$ (S1), $[\text{Ho}_{25\text{Å}}/\text{Y}_{40\text{Å}}]_{20}$ (S2), $[\text{Ho}_{25\text{Å}}/\text{Y}_{20\text{Å}}]_{20}$ (S3), $[\text{Ho}_{20\text{Å}}/\text{Y}_{30\text{Å}}]_{20}$ (S4) и $[\text{Ho}_{60\text{Å}}/\text{Y}_{30\text{Å}}]_{20}$ (S5) синтезированы методом молекулярно-лучевой эпитаксии и представляет собой последовательность слоёв $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Nb}_{50\text{Å}}/\text{Y}_{200\text{Å}}/(\text{Ho}/\text{Y})\times n/\text{Nb}_{50\text{Å}}$, где $n=30$ для образцов S4 и S5 и $n=20$ для образцов S1, S2 и S3. Эксперименты по рассеянию поляризованных нейтронов, проведённые на рефлектометрах MARIA (JCMS, Jarmany) и SuperADAM (ILL, France), демонстрируют появление обменной спиновой спирали с когерентной длиной спирали порядка 500 Å при температуре ниже, чем в «объёмном» образце. Переход в ферримагнитную фазу в образцах S4 и S5 при температуре 20 К практически подавлен. При охлаждении образца в отсутствие внешнего магнитного поля ниже точки Нееля наблюдается равная заселённость левых и правых доменов магнитных спиралей. Среднее значение киральности $\langle\gamma\rangle$ определяется как поляризационно-зависимая часть магнитного рассеяния нейтронов. Охлаждение системы во внешнем магнитном поле, приложенном в направлении базисной плоскости, приводит к нарушению в заселённости левых и правых спиральных доменов в образцах S1, S3 и S4. Для образцов S2 и S5 параметр киральности сохраняется равным нулю. При этом для образца S4 величина и знак параметра $\langle\gamma\rangle$ не зависят от направления приложения магнитного поля в базисной плоскости. Нарушение заселённости левых и правых спиралей, предположительно, связано с возникновением на границе раздела взаимодействия ДМ.

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

Исследование магнитных свойств многослойных неоднородных наноструктур методом рефлектометрии поляризованных нейтронов

*В. Уклеев^{1,2}, Е.А. Дядькина¹, А.А. Воробьёв², D. Lott³, А.В. Ситников⁴,
Ю.Е. Калинин⁴, С.В. Григорьев^{1,5}*

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

² *Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

³ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

⁴ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

⁵ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Объектом исследования в данной работе являются многослойные магнитные гетероструктуры металл-диэлектрик (МД) / полупроводник (ПП). В этих неоднородных наноструктурах толщина и морфология слоёв, размеры и концентрация металлических наночастиц играют ключевую роль в формировании электрических и магнитных свойств структуры. В рамках представленной работы было проведено исследование серии образцов $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{(1-x)}/a\text{-Si:H}]_{40}$ в зависимости от концентрации x магнитного материала методом рефлектометрии поляризованных нейтронов. Были исследованы три образца с концентрацией $x=34\%$, 47% , 60% ат.

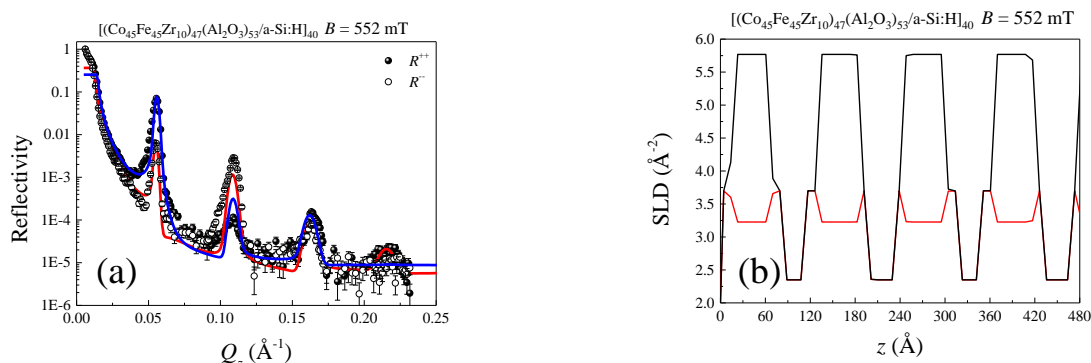


Рис. 1. (a) Кривые отражения поляризованных нейтронов от образца $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{47}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{53}/a\text{-Si:H}]_{40}$ в поле $B=552$ мТ и (b) соответствующий профиль плотности длины рассеяния.

На Рис.1 показаны кривые отражения и соответствующий профиль плотности длины рассеяния для образца образцов $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{47}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{53}/a\text{-Si:H}]_{40}$. Соответствующая модель состоит из четырёх слоёв в каждом периоде многослойной структуры, то есть каждый МД слой разбивался на три части: магнетомёртвая часть на верхнем и нижнем интерфейсе с ПП и центральная часть с ненулевым значением намагниченности. Примечательно, что подобная магнитная неоднородность МД слоя имеет место в образцах с концентрациями $x=47\%$ и 60% ат., в то время как при $x=34\%$ ат. слой однороден, но с нулевой намагниченностью. Исходя из этого, можно предположить, что в данных структурах образуются силициды переходных металлов на интерфейсах МД / ПП, которые препятствуют магнитному упорядочению наночастиц внутри слоя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-02-12066-офи м).

Способ анализа поляризации нейтронов с помощью нецентросимметричных кубических геликоидальных магнетиков

Н.М. Чубова¹, В.А. Дядькин^{1,3}, Е.В. Москвин^{1,2}, С.В. Григорьев^{1,2}

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

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

³ *Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, Grenoble, France*

Предложен способ анализа поляризации пучков тепловых и холодных нейтронов. Предлагаемый способ основан на зависимости сечения нейтронного рассеяния от поляризации нейтронов при дифракции на магнитной спирали. В 1962 году, когда С.В. Малеев разработал теорию рассеяния поляризованных нейтронов, не было известно ни одного магнетика с односторонне закрученной спиралью. Первый такой спиновый магнетик MnSi был открыт в 1976 году, наблюдением дифракционных отражений при малых углах, рассеяния, а в 1984 году было экспериментально показано, что в MnSi спираль является односторонне закрученной [2]. В предлагаемом способе рабочим элементом анализатора поляризации нейтронов является монокристалл нецентросимметричного кубического геликоидального магнетика MnSi со структурой (B20), который имеет форму диска толщиной 1 мм и диаметром 15 мм. Спиновая спираль в MnSi формируется при $T_C = 29$ К, в диапазоне полей $H < H_{C2} \sim 500$ мТл [3]. Поскольку период спирали в MnSi равен $d = 180$ Å, то длины волн тепловых и холодных нейтронов ($\lambda \leq 2d$) дифрагируют на такой структуре. Оказалось, что отражённый пучок 100% поляризован при геометрии эксперимента, когда вектор поляризации \mathbf{P} параллелен вектору рассеяния \mathbf{Q} . При этом можно исследовать такой кристалл как эффективный анализатор поляризации падающего нейтронного пучка для нейтронов от 0.1 до 300 Å. Анализирующая способность кристалла не меняется как функция температуры и магнитного поля в пределах $T < T_C$ и $H < H_{C2}$.

Работа выполнена при частичной поддержке программы РФФИ (грант № 14-02-31146_мол_а).

1. С.В. Малеев // УФН т. 172, N 6, с. 617-646 (2002)
2. S. V. Grigoriev, and all // Revue Phys. B. 74 214414 (2006).

Test of natural chirality in polycrystalline $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ compounds

N.M. Chubova¹, E.V. Altyntbaev^{1,2}, V.A. Dyadkin^{1,3}, E.V. Moskvina^{1,2},
S.V. Grigoriev^{1,2}

¹ Petersburg Nuclear Physics Institute NRC KI, Gatchina, Russia

² Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

³ Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, Grenoble, France

We investigate two series of large polycrystalline $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ samples (12) with $x=0.1, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30$ and 0.50 . The general aim of the experiment is to determine the average structural chirality Γ for them via measurements of the magnetic chirality using small angle scattering of polarized neutrons.

We used known left-handed (first set) and right-handed (second set) seeds to grow single crystals by the Czochralski technique. Then, after the growth, we took the rest, which was left over in a crucible. After careful polishing the sample the number of crystallites in polycrystals was inspected using optical microscopy. The crystallites had needle-like shape and an average volume of order 2 mm^3 . Then, we used the small angle scattering of polarized neutrons to measure the magnetic chirality γ , which is directly coupled with the crystal handedness Γ as $\gamma = -\Gamma$.

As it is known from previous measurements the MnSi single crystal shows left-handed helix and left-handed crystallographic configuration [1]. The γ -ratio for this sample is equal to 1 ± 0.01 in the whole temperature range $T < T_C = 29 \text{ K}$ and under magnetic field $H < H_{C2} = 0.5 \text{ T}$. Thus, the scattering maps from a MnSi single crystal taken at $T = 25 \text{ K}$, were used as a standard for our measurements.

We established that the average handedness of the polycrystals does not depend on the concentration. The average chirality deviates from zero with an order of $0.1-0.2$. The deviation coincides with the seed's chiralities for nine samples. Nonetheless, this is most probably an accident, and one would not expect a causal relation between the average chirality of a polycrystal and its seed.

1. S. V. Grigoriev, D. Chernyshov, V. A. Dyadkin, V. Dmitriev, S. V. Maleyev, E. V. Moskvina, D. Menzel, J. Schoenes, and H. Eckerlebe, Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 037204.

Влияние многократного рассеяния на ядерно-магнитную интерференцию в эксперименте по малоугловой дифракции поляризованных нейтронов

*А.П. Чумаков¹, Н.А. Григорьева², К.С. Напольский³, И.В. Росляков³,
А.А. Елисейев³, Н. Eckerlebe⁴, С.В. Григорьев^{1,2}*

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

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

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

⁴*Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

Обсуждается эксперимент по малоугловой дифракции поляризованных нейтронов на двумерном пространственно-упорядоченном массиве никелевых нанонитей, внедрённых в поры матрицы анодного оксида алюминия. Рассматриваются немагнитный (ядерный) вклад и ядерно-магнитный интерференционный вклад в рассеяние, указывающий на корреляцию между магнитной и ядерной структурами. Величина магнитного рассеяния на два порядка меньше ядерного оно оказывается слабо различимым. Упорядоченная наноструктура образца приводит к сильному взаимодействию между нейтронной волной и самой структурой, которое подразумевает процесс двукратного (многократного) ядерного рассеяния. Многократное рассеяние приводит, в свою очередь, к перераспределению и уменьшению интерференционного вклада в отражения первого порядка за счёт акта вторичного рассеяния. Откорректированные Кривые интерференционного рассеяния необходимо корректировать. Представленный в работе протокол измерений может быть использован в экспериментах по рассеянию поляризованных нейтронов на аналогичных упорядоченных протяжённых магнитных наноструктурах.

Рассеяние поляризованных нейтронов на массиве магнитных нанонитей в матрице оксида алюминия

Е.Г. Яшина¹, С.В. Григорьев^{1,2}, Н.А. Григорьева¹

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

²Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В работе представлено теоретическое описание малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на тонкой мембране оксида алюминия с упорядоченными одинаковыми цилиндрическими пораами [1], заполненными магнитным материалом [2]. Сечение рассеяния представляет собой сумму трех слагаемых: ядерного, магнитного и ядерно-магнитной интерференции. Посчитана амплитуда рассеяния:

$$f_{\mathbf{Q}} = \frac{kR^2 F(\mathbf{Q})S(\mathbf{Q})}{d_{\mathbf{Q}}} \sin((A-B)d_{\mathbf{Q}}),$$

где \mathbf{Q} – переданный импульс, R – радиус пор матрицы, $S(\mathbf{Q}) = \sum_n \exp(-i\rho_n \cdot \mathbf{Q})$ – структурный фактор, суммирование ведется по положению центров пор, задаваемых векторами ρ_n , $F(\mathbf{Q}) = 2J_1(QR)/QR$ – формфактор цилиндра, $J_1(x)$ – функция Бесселя 1-ого рода и 1-ого порядка. $Ad_{\mathbf{Q}}$ и $Bd_{\mathbf{Q}}$ – амплитуды ядерного $\left(A = \frac{Lk(n_f - n_m)}{2} \right)$ и магнитного $\left(B = \frac{8L\pi^3 \mu_n m}{h^2 k} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}) \right)$ рассеяния, соответственно, L – толщина мембраны, n_f и n_m – показатели преломления для нейтронов в пленке и в нанонитях, $\boldsymbol{\sigma}$ – вектор Паули, \mathbf{M} – намагниченность нитей, а $d_{\mathbf{Q}} = 1 - Q^2 / \left[\frac{4k}{L} (A-B) \right]$.

Из анализа выражения для амплитуды рассеяния следует выделить несколько случаев:

1. Случай, соответствующий борновскому приближению, когда ядерная и магнитная амплитуды малы (аргумент синуса меньше 1).
2. Случай выхода за пределы борновского приближения происходит при аргументе синуса больше 1. Интересна геометрия, когда аргумент синуса кратен π , это соответствует отсутствию рассеяния.
3. В случае, когда амплитуды ядерного и магнитного рассеяния равны, будут дифрагировать нейтроны только с одним состоянием поляризации спина, в то время как нейтроны с другим состоянием поляризации спина будут проходить через мембрану, не рассеиваясь. Это означает, что при рассеянии пучка неполяризованных нейтронов на намагниченном массиве нанонитей, часть пучка, рассеянная на мембране, будет иметь 100% поляризацию.

1. S.V. Grigoriev, A.V. Syromyatnikov, A.P. Chumakov, et al., Phys.Rev.B, v.81, 125405, 2010.
2. С.В. Григорьев, Н.А. Григорьева, А.В. Сыромятников и др., Письма в ЖЭТФ, **85**(12), 2007, 738.

Секция «Синхротронные и рентгеновские исследования»

Small Angle X-ray Scattering Study of Hexosome Loading with Proteins

*B. Angelov*¹, *A. Angelova*², *V. M. Garamus*³, *M.s Drechsler*⁴, *P. Stepanek*¹,
*S.Lesieur*²

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

² *Institut Galien Paris-Sud, Univ Paris Sud 11, Châtenay-Malabry, France,*

³ *Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany,*

⁴ *University of Bayreuth, Bayreuth, Germany*

Loading and release of therapeutic molecules, and in particular proteins, is an important topic in drug delivery nanoscience. In this work, lipid nanoparticles with inverted hexagonal symmetry (hexosomes) are obtained *via* self-assembly, using the lipid monoolein as the major component, and studied by small-angle X-ray scattering (SAXS) and cryo transmission electron microscopy (cryoTEM). SAXS performed at the BioSAXS beamline at synchrotron PETRA III (Hamburg, Germany) established the modulation of the structural organization of the soft matter liquid crystalline nanoparticles upon interaction with the proteins. The obtained structural results contribute to improve the design of therapeutic nanostructures for neurodegenerative disease treatment.

1. A. Angelova, B. Angelov, M. Drechsler, V.M. Garamus, S. Lesieur, Protein entrapment in PEGylated lipid nanoparticles. *Int. J. Pharm.* 454, 625 (2013).

Особенности фазовой диаграммы цирконата-титаната свинца с малой концентрацией титана

Д. Андроникова¹, А. Босак³, Р. Бурковский^{1,3}, С.Б. Вахрушев², Н.Г. Леонтьев⁴, И.Н. Леонтьев⁵, А.В. Филимонов¹, Д. Чернышев³, А. Шаганов¹

¹ Saint-Petersburg State Polytechnical University, St.Petersburg, Russia

² Ioffe Phys.-Tech. Institute, St.-Petersburg, Russia

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁴ Azov-Black Sea State AgroEngineering Academy, Zernograd, Russia

⁵ Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

Цирконат-титанат свинца $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ (ЦТС) с момента своего открытия является одним из самых активно исследуемых сегнетоэлектриков. Внимание, уделяемое данному соединению, обусловлено его уникальными пьезоэлектрическими свойствами, которые делают ЦТС лидером на рынке пьезоэлектрических материалов.

Фазовая диаграмма ЦТС довольно сложна. При высоких температурах ЦТС имеет структуру перовскита. При понижении температуры происходит переход сначала в ромбоэдрическую сегнетоэлектрическую фазу, а затем в орторомбическую антисегнетоэлектрическую. Данная последовательность переходов наблюдается для ЦТС с малой концентрацией титана (примерно до 5% Ti). Перестройка из кубической симметрии в ромбоэдрическую сопровождается возникновением сверхструктуры М-типа с координатами зоны Бриллюэна $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$. Согласно работам [1,2] в данной сегнетоэлектрической фазе имеет место несоразмерная модуляция структуры, наблюдаемая в виде расщепления М-пиков и связываемая с наличием антифазных границ в сетке антипараллельных смещений ионов свинца. Несмотря на большое количество работ в данной области, полная картина, описывающая фазовые переходы в области малых концентраций Ti, для ЦТС отсутствует.

На линии SNBL синхротронного источника ESRF была проведена серия дифракционных экспериментов по исследованию структуры и особенностей диффузного рассеяния в ЦТС. Объектом исследования послужили монокристаллы $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ с большой концентрацией Zr ($x = 0.007, 0.015, 0.03$). Измерения производились в режимах нагрева и охлаждения в широком интервале температур. В результате получены карты распределения диффузного рассеяния. По форме диффузное рассеяние аналогично наблюдаемому в цирконате свинца. Прослежены зависимости интенсивностей диффузного рассеяния от температуры. Из дифракционных данных извлечены температурные зависимости интенсивности сверхструктурных отражений. В области ромбоэдрической симметрии обнаружено ранее упомянутое расщепление М $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ сверхструктуры.

1. D. Viehland, Phys. Rev. B **52**, 778 (1995)

2. S. Watanabe, Phys. Rev. B, **63**, 134103 (2001)

Modeling and synchrotron data analysis of modified Hydroxyapatite structure

A.V. Bystrova^{1,2}, V.S. Bystrov³, Yu.D. Dekhtyar¹, A.I. Popov^{4,5}

¹ Biomedical Engineering and Nanotechnology Institute, Riga Technical University, Riga, Latvia

² Institute of Theoretical and Experimental Biophysics RAS, Pushchino, Russia

³ Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Pushchino, Russia

⁴ Institute of Solid State Physics, Latvian University, Riga, Latvia

Hydroxyapatite (HAP) is one of the most demanded materials in implantology of bones and teeth [1–5]. The main usage area is HAP coating on bone and dental implants to modify their surface properties for the best osseointegration [1, 2].

The results are based on the first principal modeling and calculations for HAP nanostructures as native as well surface modified, charged and having various defects (H and OH vacancies, H inter-nodes). HAP structures having being studied using Local Density Approximation (LDA) method with calculations of Density of States (DOS) allow us analyzing the experimental forbidden energy gap (E_g) and work function data. Molecular modeling by HyperChem is confirmed by photoelectron monochromatic measurements up to 6 eV and photo-luminescence (PL) data from synchrotron DESY experimental data up to 30 eV values. Brief analysis of the influence of heating, microwave radiation, hydrogenation, x-rays and synchrotron radiation on Hydroxyapatite (HAP) surface is presented in this work. New data of the structure of modified hydroxyapatite are obtained. The determined energy levels for H internodes is $E_{H-int} \sim E_v + (1.5 - 2.0)$ eV, while for OH vacancy energy is in the range of $E_{OH-vac} \sim E_v + (2.9 - 3.4)$ eV inside the forbidden zone E_g . The analysis of PL emission allow us to conclude that these energies is close to observed main PL spectral line 420 nm (2.95 eV), and consequently OH vacancy could play the leading role in the surface energy levels changes and charging. But the influence of the inserted hydrogen is revealed too through excitation from most deep valence band levels due to existence of close overlapped molecular orbital with phosphorus atoms in the excited states. Both defects are observed by PL emission spectrum under synchrotron excitation energy in diapason $\sim 8.5 - 14.5$ eV.

1. Bystrov V.S., Paramonova E., Dekhtyar Yu., Katashev A., Karlov A., Polyaka N., Bystrova A.V., Patmalnieks A., Kholkin A.L. Computational and experimental studies of size and shape related physical properties of hydroxyapatite nanoparticles. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2011. V. 23. P. 065302 (10pp).
2. Bystrov V.S., Bystrova N.K., Paramonova E.V., Dekhtyar Yu.D. Interaction of charged hydroxyapatite and living cells. I. Hydroxyapatite polarization properties. *Mathematical biology and bioinformatics.* 2009. V. 4. № 2. P. 7–11

Рентгенодифракционный анализ инвертированных опалоподобных наноструктур

Г.А. Вальковский¹, С.В. Григорьев¹, Н.А. Григорьева¹, Д.Ю. Чернышев^{1,2},
А.А. Мистонов¹

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

² European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Опалоподобные структуры, являющиеся коллоидными кристаллами, состоящими из плотноупакованных сферических частиц субмикронного размера, представляют интерес благодаря своим уникальным оптическим свойствам. Расширение области применения реализуется для инвертированных опалоподобных структур (ИОПС), при получении которых пустоты между частицами заполняют требуемым веществом, а затем матрицу удаляют. Такие объекты представляются особенно перспективными в связи с возможностью получения связи между оптическими свойствами коллоидного кристалла и магнитными, тепловыми и другими свойствами внедренного материала.

В работе изучаются ИОПС, полученные методом электрохимического осаждения Ni в пустоты коллоидных кристаллов, сформированных из монодисперсных полистирольных микросфер на подложке Si, покрытой слоем Au [1]. Рентгенодифракционные измерения ИОПС проводились на Европейском источнике синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция) в геометрии прохождения. Длина волны используемого излучения составляла ~ 0.07 нм. Показано, что размер областей когерентного рассеяния (ОКР) Ni, характеризующегося кубической гранецентрированной решеткой, во всех образцах составляет больше или порядка 10 нм, что значительно меньше размеров кристаллитов, определенных методами микроскопии (100-150 нм). В образцах присутствуют дефекты упаковки как деформационные, так и двойниковые. При этом, размер ОКР больше, а концентрация дефектов меньше для образцов, имеющих меньшую толщину. Отжиг образцов (нагрев до 500 К с последующим охлаждением до 298 К) приводит к увеличению размера ОКР и уменьшению количества дефектов. Определены температуры Дебая и коэффициенты теплового линейного расширения. Показано, что найденные коэффициенты расширения больше соответствующих значений для объемного материала, что согласуется с результатом работы [2], полученным для наноструктурированной пленки Ni.

1. N. Sapoletova, T. Makarevich, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 15414, 12 (2010).
2. Y. Kuru, M. Wohlschlogel, et al., Appl. Phys. Lett. 243113, 90 (2007).

Моделирование формы рентгеновской линии поверхностных слоёв цементированного железа

В.В. Волков, А.В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Применение экспериментальных методов нейтронной физики и синхротронного излучения к решению прикладных задач в настоящее время весьма актуально, но, к сожалению, встречает затруднения в широком практическом использовании. Рентгеновские методы достаточно просты, широко распространены и обладают такими важными достоинствами как безопасность, доступность и отсутствие необходимости в разрушении образца. В данной работе с целью увеличения глубины анализа диффузионно-насыщенных углеродом поверхностных слоев сталей и исследования возможности разработки неразрушающего рентгеновского метода контроля цементированных слоев в кинематическом приближении выполнено математическое моделирование формы рентгеновской линии (ФРЛ) поликристаллического железа для наиболее проникающего характеристического рентгеновского излучения Mo K_α . Алгоритм численного моделирования ФРЛ и методика анализа слоев изложены в работе [1]; условия диффузии и параметры моделирования соответствовали стандартным технологическим условиям цементации сталей. Особое внимание уделено анализу случаев, когда толщина цементированных слоев (~100-200 мкм) существенно превышает глубину проникновения рентгеновского Mo K_α в железе, составляющую ~60 мкм.

Результаты моделирования ФРЛ показали, что величина максимума интенсивности отражения линии $(211)_{\text{Fe}} \text{Mo K}_\alpha$ с вульф-брэгговским углом отражения, соответствующему положению линии твердого раствора с предельно высокой концентрацией углерода, может служить мерой толщины науглероженного слоя при изменении параметра $(Dt)^{1/2}$ (D – коэффициент диффузии углерода в железе, t – время диффузии) в пределах от 50 до 200 мкм наблюдаются изменения относительной интенсивности в интервале от 0.87 до 0.98. При стандартной дифрактометрической схеме рентгеносъемки это обеспечивает точность измерения толщины цементированного слоя порядка ~10 %.

Анализируются чувствительность, точность, границы применимости метода, оптимальные режимы и параметры выполнения измерений и процедуры контроля. Обсуждаются возможности применения синхротронного излучения для анализа цементированных слоев.

Исследование особенностей мартенситного перехода в тонких плёнках сплава Гейслера Ni-Mn-In методом рентгеновской дифракции

А.И. Грунин¹, А.Ю. Гойхман¹, С.С. Медведева¹, П.А. Ершов¹, В.В. Родионова^{2, 1}

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

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

Сплавы Гейслера - выдающийся класс тройных интерметаллических соединений, имеющих большое количество необычных свойств, которые в свою очередь сильно зависят от многих факторов, таких как концентрации элементов и внешние условия (температура, давление и т.д.). Дополнительно расширить возможности применения данных материалов можно переходя от объёмных материалов к тонким плёнкам.

В данной работе были проведены исследования структурных, магнитных и химических свойств тонких плёнок сплава Гейслера Ni-Mn-In, сформированных методом импульсного лазерного осаждения.

Были исследованы зависимости фазообразования и мартенситного перехода в зависимости от типов подложки, энергий лазеров, уровня вакуума и концентраций элементов в образцах.

В частности было показано значительное увеличение температурного интервала мартенситного перехода (до 100-150К) в тонких (до 100нм) плёнках по сравнению с объёмными материалами.

Так же было показано, что тонкоплёночные образцы Ni₅₂Mn₃₂In₁₆, сформированные на подложках предокисленного кремния и MgO имеют разную кристаллическую структуру (B2 для кремния и L2₁ для MgO) при одинаковых условиях формирования.

Дефекты и структура двумерных и квазидвумерных опалоподобных кристаллов

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

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Пространственно-упорядоченные наносистемы обладают рядом уникальных свойств, которые могут лечь в основу новых приборов и материалов. Особый интерес, ввиду их необычных магнитных характеристик, представляют наноструктуры, выполненные из ферромагнитных материалов и обладающие периодом решетки, сопоставимым с длиной волны света [1], однако методы получения таких материалов достаточно сложны. В связи с этим, необходимо разрабатывать методики аттестации и определения дефектности данных структур.

В данной работе с помощью GISAXS техники и атомно-силовой микроскопии (АСМ) были определены структурные свойства инвертированных опалоподобных структур (ИОПС) на основе кобальта и никеля. ИОПС получали путем внедрения ферромагнетика в структурные пустоты между сферами микронного размера, упакованными в гранецентрированную кубическую решетку с последующим удалением самих сфер. Для однозначной интерпретации дифракционных картин было проведено полное моделирование GISAXS рассеяния в программном пакете ISGISAXS и разработана программа, вычисляющая влияния структурного фактора на процесс рассеяния. Было установлено, что форм-фактор оказывает существенное влияние на процесс рассеяния только в случае образцов, выполненных из никеля, обладающего изотропной кристаллической структурой, толщина которых составляет половину монослоя. В остальных случаях для интерпретации GISAXS рассеяния достаточно учитывать только структурный фактор. Результаты GISAXS и АСМ измерений расходятся не более чем на пять процентов. Было установлено экспериментально и подтверждено моделированием, что дифракционные пики от данных ИОПС должны иметь лоренцевскую форму, что позволяет сделать заключение об экспоненциальном спаде корреляционной функции форм-факторов с расстоянием. Определены периоды решетки и корреляционные длины всех исследованных образцов.

В целом результаты измерений и моделирования свидетельствуют о высоком качестве исследованных образцов и дают основания полагать, что данные системы подходят для дальнейшего прецизионного исследования их магнитных свойств.

1. Mistonov, A. A., Grigoryeva, N. A., Chumakova, A. V., Eckerlebe, H., Sapoletova, N. A., Napolskii, K. S., & Grigoriev, S. V. (2013). Three-dimensional artificial spin ice in nanostructured Co on an inverse opal-like lattice. *Physical Review B*, 87(22), 220408.

Исследование мезоструктуры композитов на основе целлюлозы с наночастицами серебра методом МУРР

К.В. Ездакова¹, Г.П. Копица¹, Р.Ю. Смыслов², Т.Н. Некрасова²,
А.К. Хрипунов², А.А. Ткаченко³, В. Angelov⁴

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

⁴ Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic

В настоящее время в медицине актуальной проблемой является создание новых наноматериалов, таких как: раневые повязки, искусственный хрящ, прекурсор костной ткани. У современных подходов, например при создании универсального раневого покрытия, есть определенные недостатки, к которым относятся: сложность синтеза материала, отсутствие некоторых необходимых свойств и высокая себестоимость [1]. Одними из перспективных в этой области считаются нанокпозиционные материалы, созданные на основе бактериальной целлюлозы с внедренными в неё наночастицами серебра, селена, фуллерена, металл-полимерных комплексов различного происхождения [2,3]. В тоже время, существующие в данном направлении разработки не решают проблем, связанных как с равномерным размещением биоактивных компонентов в матрице целлюлозы, так и с созданием материалов, удобных в применении для хирургии.

Данная работа направлена на решение указанных выше фундаментальных и прикладных задач. Для получения композитов в качестве полимерной матрицы были использованы: гель-пленка бактериальной целлюлозы (*Glucanasebacter xylinus*) и её суспензия. В качестве добавляемого компонента с антимикробными свойствами были использованы наночастицы серебра. Методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения были исследованы мезоструктура и фрактальные свойства синтезированных композитов в диапазоне от 1 до 100 нм. Из экспериментальных сечений рассеяния были определены характерные радиусы рассеивающих неоднородностей и их фрактальные размерности, а также влияние морфологии целлюлозы на структуру конечных композитов.

1. Wojciech K. Czaja et.al. / The Future Prospects of Microbial Cellulose in Biomedical Applications // *Biomacromolecules*. 2007. V. 8. No. 1.
2. Yu. G. Baklagina, et.al. / Interaction of Se⁰ Nanoparticles Stabilized by Poly(vinylpyrrolidone) with Gel Films of Cellulose Acetobacter xylinum // *Crystallography Reports*, 2006, Vol. 51, No. 4, pp. 619–626.
3. Волков В.В. и др. // *Кристаллография*. 2009. Т. 54. №2. С. 197—201.

Рентгенографическое исследование структуры 4-нитроанилина

Т.А. Екимова, А.А. Лобова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Ароматические амины и их производные, благодаря высоким реакционным и комплексообразующим способностям, играют важную роль в создании наноразмерных супрамолекулярных систем, биомиметиков (материалов, подражающих биологическим тканям), лекарственных препаратов нового поколения, сенсоров, лигандов для металлокомплексных катализаторов.

В данной работе методом порошковой дифракции была решена структура 4-нитроанилина, $C_6H_6N_2O_2$. Исследуемый образец в виде порошка был синтезирован на кафедре молекулярной биологии, биологической и органической химии Петрозаводского госуниверситета. Рентгенограммы всех образцов получены на дифрактомере ARL'XTRA в $CuK\alpha$ -излучении в интервале углов 2θ от 2° до 70° с шагом по углу 0.02° .

На сегодняшний день по данным Cambridge Structural Database (CSD) известна структура пяти полиморфных модификаций 4-нитроанилина, кристаллографические характеристики которых представлены в таблице 1. Модификации отличаются характером упаковки молекул в кристаллической решетке.

Таблица 1. Кристаллографические характеристики полиморфных модификаций 4-нитроанилина.

модификация	a, Å	b, Å	c, Å	β , °	Пр. группа
NANIL103	12.336(2)	6.07(1)	14.854(3)	35.33(1)	P 21/c
NANIL102	12.122(2)	6.0276(9)	8.487(1)	92.72(1)	P 21/n
NANIL121	12.337(5)	6.037(2)	8.597(5)	91.42(7)	P 21/n
NANIL122	8. 6010(10)	6.0430(10)	12.352(2)	91.43(3)	P 21/n
NANIL123	8.4895(2)	6.0275(2)	12.1261(3)	92.724(2)	P 21/n

Уточнение структуры проводилось методом полнопрофильного анализа рентгенограмм поликристаллов. В качестве исходных данных последовательно были использованы координаты атомов и анизотропные тепловые параметры, представленные в табл. 1. Достоверность уточнения оценивалась по общепринятым факторам недовосточности. Показано, что исследуемый материал представляет собой модификацию NANIL103. Факторы недовосточности составили: $R_p=4.49\%$, $R_w=3.07\%$. Рассчитанные по уточненным значениям координат значения длин связей и расстояния между атомами лежат в области кристаллохимически достоверных значений.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического развития ПетрГУ на 2012 - 2016 годы.

Построение карт обратного пространства высокого разрешения для наногетероструктуры Si-Ge с помощью преломляющих рентгеновских линз

П. Ершов¹, С. Кузнецов², В. Юнкин², Р. Zaumseil³, И. Снигирева^{4,1}, А. Гойхман¹,
А. Снигирев^{4,1}

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

² Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

³ IHP, Frankfurt (Oder), Germany

⁴ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Одним из направлений развития нано- и микро- электроники является создание трехмерных полупроводниковых структур малого размера. Примером использования таких технологий является КМОП матрицы для детектирования электромагнитного излучения, где на подложке расположены миллионы пикселей – полупроводниковых гетероструктур [1]. Для стабильной работы таких устройств необходима отработка технологий роста полупроводниковых элементов, что в свою очередь требует использование точных методов контроля и диагностики качества структур.

Для исследования наногетероструктур традиционно используется методика трехкритстальной рентгеновской дифрактометрии, позволяющая получать карты обратного пространства высокого разрешения [2], по которым удается сделать выводы о кристаллическом совершенстве наногетероструктуры.

Нами были получены карты обратного пространства высокого разрешения (рис. 1(б)) для наногетероструктуры Si-Ge (рис. 1(а)) в схеме брегговской дифракции на станции ID06 европейского источника синхротронного излучения в г. Гренобль, Франция (ESRF). В качестве анализатора мы использовали преломляющие рентгеновские линзы [3] на энергии излучения 14 КэВ, что позволило достигнуть углового разрешения порядка 1 угловой секунды (кривая качания кремния (111) составляет ~5 угловых секунд на энергии 14 КэВ).

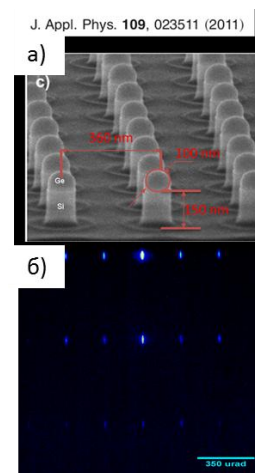


Рис. 1.

1. N. Wermes, "Pixel detectors for particle physics and imaging applications", Nucl. Instr. and Methods in Physics Research A, 512, 277–288 (2003)
2. P. Zaumseil and et al., "X-ray characterization of Ge epitaxially grown on nanostructured Si(001) wafers", Journal Of Applied Physics, 109, 023511 (2011)
3. Petr Ershov, Sergey Kuznetsov, Irina Snigireva, Vyacheslav Yunkin, Alexander Goikhman and Anatoly Snigirev, "Fourier crystal diffractometry based on refractive optics", J. Appl. Cryst. 46, 1475–1480 (2013).

Исследование свойств материала и формы профиля рентгеновских преломляющих линз

*И.И. Лятун¹, А.Ю. Гойхман¹, П.А. Ершов¹, С.С. Медведева¹,
И.И. Снигирева^{1,2}, А.А. Снигирев^{1,2}*

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

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Источники синхротронного излучения (СИ) третьего поколения обладают мощным исследовательским инструментарием, применяемым во многих областях науки и техники. В настоящее время во всем мире идет активное обсуждение перехода на источники 4го поколения с размерами источника до 10 мкм и расходимостью пучка рентгеновского излучения до 10 микро-радиан. Различные методы диагностики с использованием жесткого рентгеновского излучения (от 10 до 100 КэВ) обладают огромным потенциалом для исследования структур и материалов наноразмерного масштаба. Поэтому большой интерес представляют элементы рентгеновской оптики субмикронного разрешения [1]. Составные преломляющие линзы с параболическим профилем позволяют фокусировать рентгеновское излучение в пятно субмикронного размера на расстоянии менее 10 см [2].

В данной работе приведены результаты исследования профилей (форм) рентгеновских линз с радиусами закругления 50, 200 и 500 мкм методами рентгеновской томографии, электронной микроскопии, реплик-профилометрии. Особая сложность в исследовании профиля линзы возникает по причине малых размеров радиуса линзы ($R = 50 \div 500$ мкм) [3]. Кроме того, в работе представлены результаты исследования свойств материала используемых преломляющих линз и бериллиевых рентгеновских окон на станции ID06 (в Европейском источнике синхротронного излучения ESRF) в схеме рентгеновской микроскопии и малоуглового рассеяния. Проведенные исследования показывают высокую степень влияния внутренней структуры материала на рентгеногомогенность рентгенооптического элемента.

Таким образом, в работе продемонстрированы методы лабораторных и синхротронных исследований для аттестации качества линз и рентгеновских окон.

1. A. Snigirev, I. Snigireva, "Hard X-ray Microoptics", Springer Series in Optical Sciences vol. 137, 255-285, 2008
2. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, A. Souvorov, and B. Lengeler, "Focusing High-Energy X Rays by Compound Refractive Lenses," Appl. Opt. 37, 653-662 (1998)
3. Lengeler B, Schroer C G, Benner B, Gerhardus A, Gunzler T F, Kuhlmann M, Meyer J and Zimprich C. 2002 J. Synchrotron Radiat. 9 119-24

Исследование озерно-болотных отложений Прибайкалья с использованием синхротронного излучения

Ю.Н. Маркова¹, Е.В. Кербер¹, Е.А. Анчутина², К.В. Золотарев³

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

² *Уральский НИИ метрологии, Екатеринбург, Россия*

³ *Институт ядерной физики СО РАН им. Г.И. Будкера, Новосибирск, Россия*

Озерно-болотные отложения Восточного побережья оз. Байкал представляют особый интерес для исследователей, поскольку они получили обширное развитие в постгляциальный этап и существовали как изолированная природная система со спокойным режимом осадконакопления. Поэтому подобные отложения являются уникальным природным архивом палеоклиматических данных. Оценка качества методики рентгенофлуоресцентного анализа с применением синхротронного излучения (РФА СИ) показала, что данный метод дает достоверную информацию для палеоклиматических реконструкций [1] при исследовании донных отложений озер. Однако, прежде всего, необходимо было оценить возможность применения данной методики для анализа состава торфа озерно-болотных отложений, поскольку они отличаются по составу от донных осадков и имеют повышенное содержание органического вещества, что делает их схожими с растительными материалами. Для этого были использованы государственные стандартные образцы ЭК-1 (элодея канадская), Тр-1 (травосмесь) и ЛБ-1 (лист березы). Было установлено, что данную методику можно рекомендовать для получения аналитических данных при использовании вышеуказанных стандартных образцов растительного состава, в том числе, и для определения массовых долей таких важных при палеоклиматических реконструкциях и экологическом мониторинге элементов, как бром и мышьяк. После установления необходимых метрологических характеристик (оценка повторяемости, внутрилабораторной прецизионности, правильности и точности), был проведен элементный анализ озерно-болотных отложений, расположенных на восточном берегу Байкала. Полученные содержания элементов (таких как, Са, Fe, К, Вг, As) в торфяных отложениях указывает на продуктивность торфяников, которая, в свою очередь, отражает изменения гидрологических и климатических условий.

1. Маркова Ю.Н., Кербер Е.В., Анчутина Е.А. и др. Стандартные образцы. Применение стандартных образцов донных отложений для оценки качества результатов методики рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения, № 2, 52 – 58 (2012).

Фазовые состояния системы твердых растворов $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$ при высоком давлении

А.С. Михейкин

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

На (Т-х)-диаграмме фазовых состояний $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$ существует мультикритическая точка, в которой соприкасаются кубическая (пр. гр. $\text{Fd}\bar{3}m$), две антиизоструктурные тетрагональные (пр. гр. $\text{I4}_1/\text{amd}$) и ромбическая (пр. гр. Fddd) фазы [1]. Существование таких точек было предсказано Ландау [2], причем в окрестности многие обобщенные восприимчивости демонстрируют аномальный характер [3-6].

Целью настоящей работы является исследование структуры твердых растворов $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$ в окрестности мультикритической точки фазовой диаграммы и изучение ее эволюции под влиянием давления.

Керамические образцы твердых растворов $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Cr}_2\text{O}_4$ с $x = 0.95, 0.9, 0.88, 0.85, 0.80, 0.75$ синтезированы по стандартной твердофазной методике.

Порошковые рентгенограммы получены на Швейцарско-Норвежской линии Европейского центра синхротронного излучения (BM01A-SNBL, ESRF, Гренобль, Франция) при комнатной температуре с использованием ячейки с алмазными наковальнями. Длина волны излучения 0.70213 \AA и 0.68332 \AA .

Независимо от микроскопического механизма, который в случае изучаемых шпинелей связан с ян-теллеровскими искажениями кристаллической структуры, наблюдаемые фазовые переходы можно классифицировать как собственные сегнетоэластические. Изменение структуры сопровождается возникновением спонтанной деформации, которая рассматривается как параметр порядка (ПП), а его зависимость от давления хорошо описывается феноменологической моделью, учитывающей разложение свободной энергии по компонентам ПП до шестой степени.

Объемный модуль упругости K_0 и его первая производная K' определены с помощью аппроксимации экспериментальных зависимостей $V(p)$, используя уравнение состояния Бирча-Мурнагана третьего порядка. Так для твердого раствора $\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{Cr}_2\text{O}_4$, находящегося в тетрагональной фазе, $K_0 = 191.683 \pm 1.580 \text{ ГПа}$, $K' = 5.481 \pm 1.134$ при $V_0 = 577.604 \pm 0.048 \text{ \AA}^3$, что хорошо согласуется с литературными данными для подобного класса веществ.

Работа финансово поддержана грантом РФФИ № 13-02-12416.

1. I.Y. Kino, S. Miyahara, J. Phys. Soc. Jpn. 21, 2732 (1966).
2. L.D. Landau, Phys. Zs. Sowjet. 11, 26 (1937)
3. В.П. Сахненко, В.М. Таланов, ФТТ 21, 2435 (1979).
4. V. P. Dmitriev, et.al., Phys. Rev. B 75, 024111 (2007)
5. Ю.М. Гуфан, Е.С. Ларин, ДАН СССР 242, 1311 (1978).
6. А.А. Mukovnin, V.M. Talanov, Solid State Commun. 152, 2013 (2012).

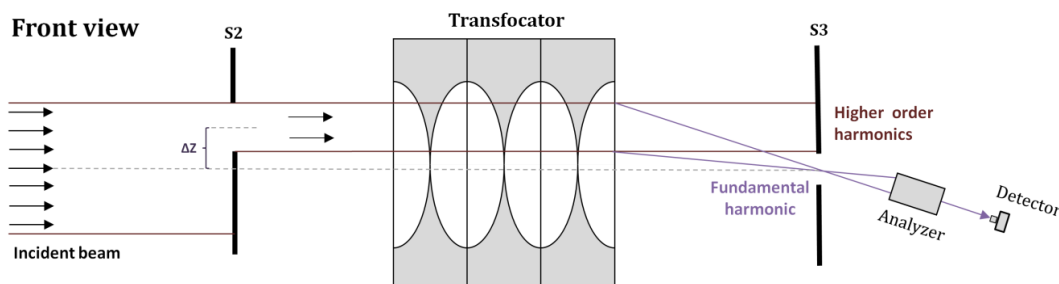
Использование составных преломляющих рентгеновских линз для подавления высших гармоник рентгеновского излучения

М. Поликарпов¹, И. Снигирева², А. Снигирев²

¹ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия

² European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Был предложен новый метод подавления высших гармоник рентгеновского излучения, основанный на использовании преломляющей рентгеновской оптики. Принимая во внимание факт того, что фокусное расстояние преломляющей рентгеновской линзы зависит от энергии падающего на неё излучения¹, использование внеосевого освещения линзы приводит к пространственному разделению спектра энергии пучка после линзы. В результате происходит фокусировка основной гармоники, а нефокусированное высокоэнергетическое излучение подавляется с помощью экрана-поглотителя или щели.



Соответствующий эксперимент был проведен на станции ID06 Европейского источника синхротронного излучения с использованием составных преломляющих линз внутри рентгеновского трансфокатора². Использование данного метода подавления высших гармоник позволило снизить присутствие третьей гармоники в спектре в 10^3 раз. В общей сложности, метод позволяет обеспечить подавление высших гармоник рентгеновского излучения в 10^5 раз при дополнительном использовании метода расстройки монохроматора.

Описанный метод хорошо подходит для источников синхротронного излучения третьего поколения и является очень перспективным для использования на будущих источниках IV-го поколения.

По результатам работы опубликована статья: M. Polikarpov, I. Snigireva and A. Snigirev; *X-ray harmonics rejection on 3rd generation synchrotron sources using Compound Refractive Lenses*; Journal of Synchrotron Radiation; **Accepted** 12.01.2014

1. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, and B. Lengeler, Nature **384** (6604), 49 (1996).
2. A. Snigirev, I. Snigireva, G. Vaughan, J. Wright, M. Rossat, A. Bytchkov, and C. Curfs, Journal of Physics: Conference Series **186** (1), 012073 (2009).

Исследование структуры соединений на основе полтитанатов калия, модифицированных $K_2Cr_2O_7$

С.И. Саунина¹, Ш.Ш. Ягафаров¹, А.В. Гороховский², Третьяченко Е.В.²

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Саратовский государственный технический университет им. Ю.А.Гагарина, Саратов, Россия

Методом рентгеноструктурного анализа (РСА) изучен фазовый состав образцов базового полтитаната калия (ПТК) и протонированного полтитаната калия (ПТКП), обработанных в водных кислых растворах дихромата калия. Образцы прошли термообработку при температуре 850 °С в течение 2х часов.

На рентгенограммах образца базового ПТК, обработанного $K_2Cr_2O_7$ наблюдаются широкие дифракционные максимумы в области углов $2\theta \sim 30$ и 48 градусов, которые, по-видимому, формируются путем наложения интенсивных максимумов нанодисперсного $K_2Ti_6O_{13}$ и $K_2Ti_8O_{17}$. Также на рентгенограмме присутствуют дифракционные линии рутила и следы $K_2Cr_2O_7$. Размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) титанатов калия ~ 1 нм, а диоксида титана модификации рутил ~ 40 нм.

После термообработки при 850 °С наблюдается уменьшение количества исходных нанодисперсных фаз и увеличение их средних размеров в ~ 10 раз. При этом в образце появляются четыре новые фазы: TiO_2 - модификации анатаз, $K_2Cr_3O_{10}$, K_2CrO_4 и Cr_2O_3 , образование которых вероятно связано с частичным термическим разложением дихромата калия. Кристаллы анатаза имеют размеры ~ 40 нм. Также после термообработки при 850 °С происходит и изменение цвета образца с лимонного до бледно оранжевого.

На рентгенограммах образца протонированного ПТКП, обработанного $K_2Cr_2O_7$ присутствуют дифракционные максимумы соответствующие фазе TiO_2 - модификации рутил. Широкие дифракционные максимумы в области углов $2\theta \sim 30$ и 48 градусов сформированы путем наложения наиболее интенсивных максимумов нанодисперсных $K_2Ti_6O_{13}$ и других титанатов калия отличающихся разным соотношением $K_2O : TiO_2$.

Термообработка при 850°С обуславливает появление в образце по данным РСА наряду с исходными фазами фазы TO_2 модификации анатаз, не приводит к существенному изменению фазового состава образца, по сравнению с образцом на основе базового полтитаната калия. Цвет образца бледно оранжевый. Это может указывать на образование небольшого количества K_2CrO_4 и Cr_2O_3 .

Сверхтонкие пленки железо-иттриевого граната полученные методом лазерной молекулярно-лучевой эпитаксии

Д.А. Баранов¹, К.Ю. Максимова², А.И. Грунин², М.В. Загорянская¹,
А.М. Коровин¹, Л.В. Луцев¹, Н.С. Соколов¹, С.М. Сутурин¹, В.В. Федоров¹

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

² Балтийский федеральный университет им. И.Канта, Калининград, Россия

Пленки железо-иттриевого граната (ЖИГ; $Y_3Fe_5O_{12}$) уже много лет находят применение в микроволновых (СВЧ) устройствах. Однако в последние годы [1] появилось новое направление, связанное с возможностью интеграции в полупроводниковую электронику. Так же было показано [2] что в тонких (<100 nm) пленках можно ожидать существенного уменьшения константы затухания спиновых волн, что представляет значительный интерес для приложений (фильтров и линий задержки СВЧ диапазона).

В представляемом исследовании при помощи метода лазерной молекулярно лучевой эпитаксии были получены слои ЖИГ толщиной от 12 до 84 нм на подложках (111) галлий-гадолиниевого граната (ГГГ; $Ga_3Gd_5O_{12}$). Содержание железа и иттрия контролировалось методом рентгеноспектрального микроанализа и совпадало с формульной единицей $Y_3Fe_5O_{12}$. Структурные свойства изучались при помощи дифракции в геометрии скользящего падения рентгеновского излучения (GIXRD) с использованием синхротронного излучения (Photon Factory, г. Цукуба, Япония, станция BL3A). Оказалось, что межплоскостное расстояние по нормали к пленке увеличено ($d_{444} = 1.807 \text{ \AA}$) в сравнении с подложкой или объемным кристаллом ЖИГ ($d_{444} = 1.786$ и 1.787 \AA соответственно) и зависит от поддерживаемого в процессе роста давления кислорода. Из анализа боковых рефлексов было установлено, что пленки псевдоморфны. Величины намагниченности насыщения (~1500 G) полученные при помощи вибрационной магнитометрии (VSM) приближаются к значениям, близким к объемному материалу (1750 G). Результаты измерений ферромагнитного резонанса ($H=150 \text{ Oe}$; $F = 1.9 \text{ GHz}$; $H_a = -1300 \text{ Oe}$) свидетельствуют о большом значении магнитной анизотропии типа легкая плоскость, достаточно узкая линия ФМР ($\Delta H=8 \text{ Oe}$) говорит о высоком качестве пленок ЖИГ.

Показано, что при помощи метода лазерной молекулярно лучевой эпитаксии можно получать сверхтонкие пленки ЖИГ высокого качества, а так же меняя давление кислорода в процессе роста контролировать напряжения и магнитную анизотропию эпитаксиальных слоев.

1. Žutić H. Dery, Nature Materials 10, 647–648 (2011)
2. L.V. Lutsev, Physical Review B, 2012, Vol. 85, Issue 21, 214413

Анализ структуры магнитных жидкостей методом анизотропного малоуглового рассеяния

*Д.И. Фрей¹, А.А. Велигжанин^{1,2}, А.А. Чернышов², Я.В. Зубавичус^{1,2},
Е.В. Яковенко², М.В. Авдеев³*

¹ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

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

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Исследование структуры магнитных жидкостей дает информацию о поведении магнитных частиц и их взаимодействии друг с другом и с магнитным полем. Это взаимодействие интересно с практической точки зрения, поскольку оно может влиять на макроскопические свойства магнитных жидкостей. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния традиционно применяется для исследования подобных систем, а внешнее магнитное поле позволяет частично снять усреднение по ориентациям в таких объектах и повысить информативность малоугловых данных.

В работе были исследованы образцы магнитных жидкостей на основе магнетита и кобальта. Двумерные картины МУРР получены на станции «ДИКСИ» Курчатовского источника синхротронного излучения в диапазоне полей до 0.2Тл. Приложение магнитного поля приводит к формированию анизотропной картины рассеяния. Величина анизотропии описывается функцией Ланжевена, что говорит о наличии в системе цепочек частиц, упорядочивающихся в поле. Структурные параметры системы, а именно, средний размер частиц, их дисперсность, расстояние между частицами в цепочке и длина когерентности вдоль цепочки, получены из анализа одномерных срезов двумерной малоугловой картины.

Детальный анализ структуры магнитной жидкости проведен с использованием численного моделирования двумерной картины рассеяния от упорядоченных цепочек магнитных сферических частиц. Расчет выполнен в приближении локальной монодисперсности, то есть считая, что в цепочку объединяются частицы одного размера. Магнитный момент цепочки определялся общим объемом цепочки, исходя из постоянной плотности магнитного момента в материале магнитных частиц, с усреднением по ориентациям, учетом распределения частиц по размерам, а цепочек по длине. В описанном приближении получены расчетные анизотропные картины рассеяния, посчитаны одномерные малоугловые кривые, найдена анизотропия в зависимости от приложенного поля. Полученные результаты моделирования качественно совпадают с экспериментальными кривыми МУРР и позволяют уточнить структурные параметры магнитных жидкостей во внешнем магнитном поле.

Исследование проведено при финансовой поддержке фонда РФФИ, грант №12-02-12063-офи-м.

Исследование мезоструктуры золь-гель систем на основе тетраэтоксисилана, модифицированных солями металлов

Т.В. Хамова¹, О.А. Шилова¹, Г.П. Коница², В. Angelov³

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

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

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

До настоящего времени наиболее широко исследуются процессы, протекающие на разных стадиях золь-гель синтеза, в кремнезолях, получаемых исходя из тетраэтоксисилана (ТЭОС). Однако гораздо более сложные процессы происходят в таких золь-гель системах при введении в них модифицирующих неорганических веществ, особенно, если вводится не одно, а несколько соединений, например, водорастворимые соли или кислоты. В результате формируется неорганический полимер со структурой ультратонкой сетки по типу «гость-хозяин». При этом в результате реакции гидролитической поликонденсации $\text{Si}(\text{OEt})_4$ формируется ультратонкая кремнеземная сетка (матрица) «хозяин», а неорганические вещества являются прекурсорами для модификаторов сетки (катионов металлов или неметаллов) «гость». В тоже время такие многокомпонентные золь-гель системы менее исследованы, несмотря на то, что именно за счет модифицирования золь-гелей удается придать композиционным материалам (покрытиям, пленкам), образующимся в результате золь-гель синтеза, необходимые технически ценные свойства. Технология получения таких пленок и покрытий напрямую зависит от особенностей процесса структурообразования золь-гель систем, как на стадии формирования золь-гелей, так и на стадии термообработки.

В настоящей работе методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) была исследована мезоструктура ксерогелей, синтезированных на основе золь-гелей тетраэтоксисилана, как немодифицированных, так и модифицированных нитратами алюминия и кобальта, а также продуктов их высокотемпературной обработки, в зависимости от вводимого модификатора. Измерения МУРР были проведены в диапазоне переданных импульсов $6 \cdot 10^{-2} < q < 11 \text{ нм}^{-1}$.

Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы рассеивающих неоднородностей и удельные поверхности, а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки.

Работа выполнена при поддержке программ Президиума РАН № 24.

Слоистая структура опалоподобных кристаллических пленок

*А.В. Чумакова¹, А.А. Мистонов^{1,2}, С.В. Григорьев^{1,2}, Н.А. Григорьева²,
Н.А. Саполетова³, К.С. Напольский³, А.А. Елисейев³, А.В. Петухов⁴*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

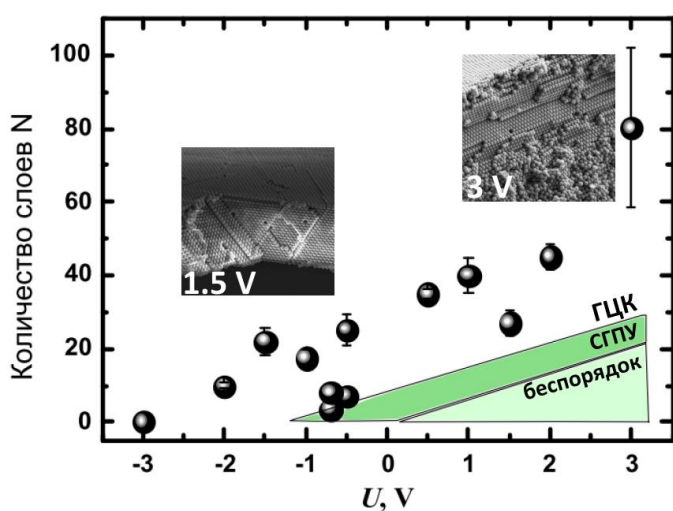
²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

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

⁴Debye Institute, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands

Проведено исследование слоистой упаковки опалоподобных кристаллических пленок методом ультрамалоугловой дифракции рентгеновского излучения, на установке DUBBLE в ESRF. Изучены несколько типов образцов: 1) опалоподобные кристаллы на основе микросфер из полистирола диаметром ~ 520 нм, полученные методом вертикального осаждения в присутствии электрического поля [1]; 2) инвертированные металлические опалоподобные кристаллы толщиной 3, 5, 7, 11, 17 и 26 слоев сферических пор матрицы, полученные методом темплатного электроосаждения.

В процессе формирования опалоподобной пленки методом вертикального осаждения, первые плотноупакованные гексагональные слои,



осаждаемые на подложку образуют СГПУ последовательность, но при дальнейшем увеличении числа слоев (более 20) структура стремится к формированию ГЦК упаковки (рисунок). Структура коллоидного кристалла зависит от напряжения, приложенного к подложкам в процессе вертикального осаждения. На подложке с отрицательным зарядом формируются

опалоподобные структуры с высокой вероятностью образования ГЦК мотива $\sim 0,8$. С увеличением напряжения толщина синтезируемой пленки уменьшается, в предельном случае образуя плотноупакованный гексагональный монослой сферических частиц. На подложке с положительным зарядом формируются разупорядоченные массивы сферических частиц. С увеличением напряжения толщина синтезируемой пленки возрастает, размер структурного домена уменьшается, возрастает мозаичность пленки.

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

Исследование свойств зерен в микро-кристаллической кремниевой матрице смектического типа методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей

М.Д. Шарков¹, М.Е. Бойко¹, А.М. Бойко¹, А.В. Бобьль¹, С.Г. Конников¹

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

В работе исследуется доменная структура смектического микро-кристаллического кремния ($\mu\text{-Si}$), применяемого в производстве солнечных элементов. На основе методики малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) проведен анализ трех образцов $\mu\text{-Si}$, выращенных в ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Измерения данных МУРР проводились на установке МАРС-2 в ФТИ им. А.Ф. Иоффе с применением $\text{Cu K}_{\alpha 1}$ рентгеновского излучения (длина волны 1.54 \AA). Регистрация кривых МУРР осуществлялась в режиме отражения для двух образцов. В то же время для третьего образца, у которого ранее была сошлифована подложка, данные МУРР были получены как в режиме отражения, так и в просвечивающем режиме.

Кривые МУРР от двух первых образцов, полученные в режиме отражения, содержали наборы брэгговских пиков, отвечающих определенной толщине слоя зерен Si для каждого из образцов. Значение толщины оказалось равным 226 ± 3 нм для одного из образцов и 22.9 ± 0.1 нм – для другого. При этом процедуры роста пленок были ориентированы на получение толщин 200 и 20 нм соответственно.

Данные МУРР, полученные для образца с удаленной подложкой в просвечивающем режиме, показали, что в нем могут содержаться низкоразмерные компоненты и квази-периодическая структура с характерным размером около 98 нм, параллельная поверхности образца. Полученная величина (98 нм) может быть связана с расстояниями между соседними зернами смектической матрицы и с толщиной зерен.

Кривая МУРР от того же образца, полученная в режиме отражения, характерна для мелкодисперсного порошка из зерен диаметром около 3 нм. Эти данные могут отвечать аморфной зернистой фазе кремния, формирующейся в приповерхностном слое образца.

Таким образом, с помощью методики МУРР были изучены три образца $\mu\text{-Si}$ и определены размеры зерен внутри смектических матриц. Полученные результаты МУРР-исследований способствуют контролю технологического процесса производства пленок $\mu\text{-Si}$.

Тонкопленочные защитные покрытия бериллиевых окон и линз для мощных источников рентгеновского излучения

*О.В. Юркевич¹, К.Ю. Максимова¹, А.Ю. Гойхман¹, И.И. Лятун¹,
А. Снигирев^{1,2}, И. Снигирева^{1,2}*

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

²*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Рентгеновская оптика на основе бериллия – преломляющие линзы, фильтры и окна - широко используется на источниках синхротронного излучения (СИ). При этом, новые источники СИ требуют существенно улучшенных свойств такой оптики, включая как качество поверхности и объема, так и высокую радиационную и химическую стойкость под воздействием мощного рентгеновского излучения. В настоящее время для предотвращения разрушающих окислительных процессов на большинстве синхротронов обязательен обдув бериллиевых изделий (БИ) инертными газами.

В данной работе был исследован способ предотвращения окисления БИ путем нанесения пассивационных покрытий. Так как некоторые БИ обладают сложной формой, так, например, рефракционные бериллиевые линзы обладают параболической формой [1] с радиусом кривизны до 50 мкм и толщиной перешейка до ~ 10 мкм, то наиболее подходящий метод для создания тонких комфортных покрытий на таких объектах – метод атомного послойного осаждения (АПО) [2]. В качестве пассивационного покрытия был выбран Al_2O_3 – превосходный диффузионный барьер для кислорода. Были проведены исследования химического состава, структуры пленки, термической стабильности, стойкости пленки в синхротронном излучении. По результатам апробации защитных покрытий на синхротроне посредством экспонирования образцов под белым немонахроматическим пучком, была продемонстрирована хорошая адгезия тонких пленок на образце. Аналогичные исследования при большем времени экспонирования проводились в монохроматическом пучке СИ и не показали изменений концентрации кислорода в пленке и фазового состояния бериллия. Совокупность экспериментальных данных позволяет оценить перспективы применения защитных покрытий Al_2O_3 , выращенных методом АПО, для дополнительного снижения требований безопасности и упрощения оптических экспериментальных схем.

1. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva and B. Lengeler, “A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays”, *Nature*, vol. 384, 49-51, 1996;
2. Riika L., Puurunen, J. *Appl. Phys.* 97, 121301 (2005)

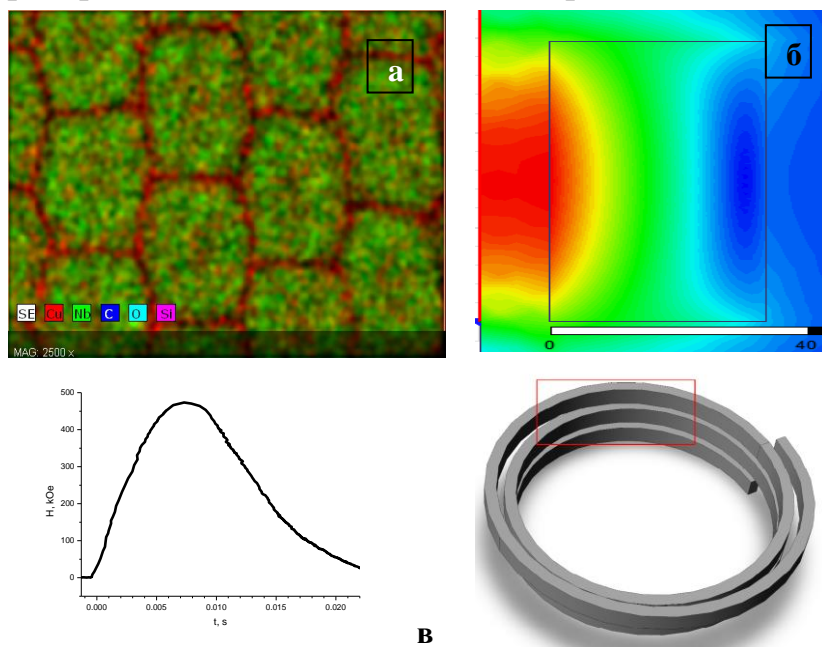
Секция «Материалы и минералы»

Соленоид с обмотками из нанотекстурированного суперпровода

А.А. Быков, С.И. Попков, А.М. Паршин, А.А. Красиков

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

Исследована конструкция соленоида с использованием в качестве обмоток наноструктурированного (рис. 1а) суперпровода Cu-Nb [1]. Комбинацией аналитических [2] и численных [3] методов проведены электромагнитный, механический и тепловой расчеты параметров соленоида, требуемых для генерации импульсных сильных магнитных полей и распределение механических напряженностей в теле соленоида (рис. 1б,



показана половина аксиального сечения, квадрат в центре – тело соленоида). По полученным параметрам изготовлен тестовый соленоид, проведены испытания и достигнуты значения поля 470 кОе (рис. 1в).

Из сопоставления расчетных и экспериментальных значений, полученных при испытании соленоида,

Рис. 1. Микроструктура, расчеты и результаты работы.

установлена его работоспособность при амплитудной напряженности генерируемого магнитного поля 400 кОе и длительности импульса 20 мс. Найдены пробойные области в теле соленоида, возникающие при переходе токопроводящей шинки квадратного сечения на новый виток (рис. 1г), оптимизация которых – тема дальнейших исследований.

1. Pansyrny V. et al. The Nanostructured High Strength High Conductivity Cu Matrix Composites With Different BCC Metals Strengthening Filaments // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2010. Vol. 20, № 3. P. 1614–1618.
2. Лагутин А., Ожогин В. Сильные Импульсные Магнитные Поля в физическом эксперименте. 1988. P. 181.
3. Skourski Y. et al. Finite-element simulation and performance of pulsed magnets // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2008. Vol. 18, № 2. P. 608–611.

Теплофизические свойства и структура композитов Cu-Ga-Sn

В.А. Быков, Т.В. Куликова, А.Б. Шубин

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В работе исследованы структурное состояние и теплофизические свойства тройных сплавов Cu-Ga-Sn следующего состава (масс.%): Cu - 40, Ga - 30, Sn – остальное. Такое содержание компонентов отвечает оптимальным реологическим характеристикам галлиевых паст (при использовании порошка-наполнителя с частицами сферической формы). С другой стороны, этот состав сплава обеспечивает высокие прочностные свойства отвержденного металлического композитного материала. Согласно нашим данным, процесс образования композиционного сплава включает следующие стадии. Первоначально жидкий сплав Ga-Sn образуется во время интенсивного встряхивания смеси порошков (Ga+Sn+Cu₃Sn). Эта жидкометаллическая смесь состоит из галлия и олова в почти эвтектическом соотношении (примерно 13,6 масс.% Sn, Ga – остальное). Далее металлическая жидкость смачивает сферические частицы Cu₃Sn, начинается процесс диффузии жидкого металла в твердый наполнитель. Взаимодействие приводит к образованию твердой фазы CuGa₂ и твердого раствора галлия в олове (примерно 5-7 масс.% Ga, Sn – остальное). Как результат, можно наблюдать метастабильный композит, состоящий из трех твердых фаз (рис. 1).

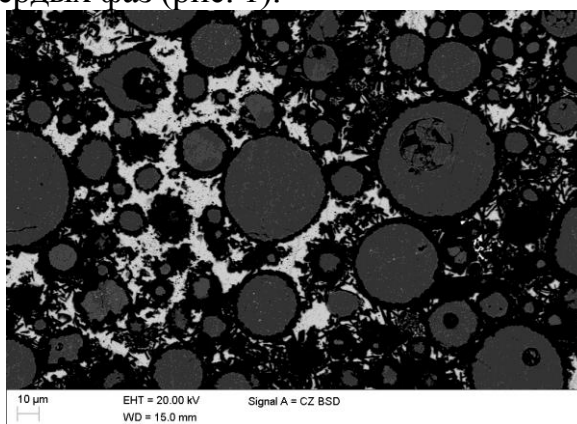


Рис. 1. Электронное изображение полированного затвердевшего образца. Светлые поля – фаза, богатая оловом, темные поля – кристаллы CuGa₂; серые диски – сечения частиц Cu₃Sn.

По результатам проведенных исследований теплофизических свойств композитов Cu-Ga-Sn удалось определить его температуру плавления - 185°C, теплопроводность – 60 Вт/(м·°C) при 85°C, коэффициент линейного расширения - 18,5 10⁻⁶/K при 25°C . По своим служебным характеристикам композит Cu-Ga-Sn является универсальным и может применяться для паяния как металлических, так и керамических материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума УрО РАН, № 12-П-3-1032.

Сравнительные мёссбауэровские исследования сверхпроводящих соединений халькогенидов железа

*Д.М. Васюков¹, К.В. Фролов¹, И.С. Любутин¹, Н.Ю. Коротков¹, Д.А. Чареев²,
А.Н. Васильев³, В.В. Беликов³, С.М. Казаков³, Е.В. Антипов³, Г.А. Калюжная⁴,
М.В. Голубков⁴, Т.А. Романова⁴*

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

²Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, Россия

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

⁴Физический институт РАН, Москва, Россия

Недавно открытый новый класс высокотемпературных сверхпроводников на основе железа представляет большой теоретический и практический интерес. Среди всего обширного класса «железных» сверхпроводников халькогениды железа ($FeSe$, $FeSeTe$, $FeTe$ и тп.) имеют самую простую кристаллическую структуру, поэтому они рассматриваются как удобный модельный объект. Тетрагональный селенид железа становится сверхпроводником при температуре 8 К [1], при приложении внешнего давления 7 ГПа температура перехода увеличивается до 37 К [2]. Но, несмотря на структурную идентичность $FeSe$ и $FeTe$, последний не переходит в сверхпроводящее состояние ни при низких температурах, ни под воздействием внешнего давления, а при температурах ниже 70 К демонстрирует возникновение сложного магнитного упорядочения ионов железа [3], которое представляет отдельный экспериментальный и теоретический интерес.

В данной работе представлены результаты сравнительных исследований порошковых образцов несверхпроводящего соединения $Fe_{1+x}Te$ и сверхпроводящего соединения $FeSe_{1-y}$ методом абсорбционной мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe в интервале температур от 5 К до 295 К. Получены данные о структурных, электронных и спиновых состояниях ионов железа для различных фаз.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 11-02-00636а и 11-02-12089, программы Российской академии наук "Сильно коррелированные электронные системы" и Проектов министерства образования и науки Российской Федерации 16.740.12.0732 и 8035.

1. F-C. Hsu et al: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 105, 14262 (2008)
2. S. Medvedev et al: Nature Materials 8, 630 (2009)
3. Blachowski, A., et al. Journal of Physics: Condensed Matter 24, 38 386006 (2012)

Разработка методов снижения саморазряда суперконденсаторов

*Р.Р. Галимзянов¹, А.А. Климонт¹, И.С. Кречетов¹, С.В. Стаханова¹,
М.В. Астахов¹, О.В. Лозовая²*

¹ НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

² ООО «Ё-Инжиниринг», Москва, Россия

Электрохимические суперконденсаторы (СК) с двойным электрическим слоем на водном электролите представляют огромный интерес для исследователей и разработчиков в силу своей экологичности, способности выдерживать большое число циклов заряда-разряда, низкой себестоимости и возможности работать в широком интервале температур. Большое значение для создания СК имеет решение задачи снижения межэлектродного саморазряда, приводящего к потере накопленной в СК энергии.

Для подавления саморазряда работающего на водном электролите (3М H₂SO₄) СК, электроды которого изготовлены из углеродной ткани Бусофит Л-0.3-135С, предложены следующие методы:

- предварительная обработка углеродного материала (УМ), используемого в качестве отрицательного электрода, восстановителем (NaBH₄) для предотвращения процессов восстановления кислородсодержащих поверхностных функциональных групп (ПФГ) в ходе саморазряда СК;

- замещение кислородсодержащих ПФГ азотсодержащими путём обработки раствором аммиака с целью изменения окислительно-восстановительных свойств УМ.

Обе обработки приводят к значительному снижению скорости саморазряда (т.е. увеличению остаточного напряжения $U_{ост}$ через несколько часов после зарядки), одновременно с ростом удельной ёмкости УМ и КПД СК, причём обработка аммиаком приводит к более выраженному изменению этих величин (таблица 1).

Таблица 1. Электрохимические характеристики УМ до и после обработок

Характеристика образца	Диапазон напряжений U , В	КПД _с , %	$C_{уд}$, Ф/г	$C_{уд}$, Ф/см ²	Остаточное напряжение $U_{ост}$, мВ		
					Через 1 час	Через 3 часа	Через 6 часов
Без модификации	0...0,8	96	113	2,96	275	60	50
После восстановления отриц. электрода NaBH ₄	0...0,8	97	133	3,21	682	574	493
После обработки NH ₃	0...0,8	99,8	152	3,71	725	695	650

Таким образом, в работе показана возможность подавления саморазряда СК с водным электролитом путём химической обработки материалов электродов, направленной на восстановление или модификацию ПФГ на поверхности углерода.

Формирование одномерных наноструктур висмута методом темплатного электроосаждения

А.С. Гончарова, К.С. Напольский, Г.А. Цирлина

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

В современной электронике широко востребованы металлические наноструктуры с физическими свойствами, отличными от свойств массивных металлов. Большим разнообразием таких свойств обладают нанонити из висмута, для которых ранее наблюдались переход полуметалл/полупроводник, появление сверхпроводимости, а также осцилляции критического тока в магнитном поле. Ряд необычных эффектов такого рода удавалось наблюдать только для поликристаллических висмутовых нитей с определенной и трудноконтролируемой ориентацией зерен и структурой межзеренных границ. Целью данной работы является управляемое получение нитевидных наноструктур висмута с варьируемыми размерами и кристаллографической ориентацией и изучение их магнеторезистивных свойств.

В работе был использован темплатный метод синтеза. В качестве матрицы выступали пленки из пористого оксида алюминия, полученные анодированием Al в 0,3 М растворе $(\text{COOH})_2$ при напряжениях 40 и 120 В. По данным растровой электронной микроскопии, диаметр пор для пленок, полученных при 40 В, составляет 53 нм, а при 120 В – 125 нм. Электрохимическое осаждение Вi проводили из электролитов, содержащих 0,1 и 0,4 моль/л $\text{Vi}(\text{NO}_3)_3$, перед осаждением электролит деаэрировали аргоном в течение 30 минут. В качестве растворителя выступала смесь этиленгликоля с водой, взятых в объемном отношении 7:3. Электроосаждение висмута в поры оксидной пленки проводили при потенциале -0,2 В относительно Вi электрода сравнения.

Средняя степень заполнения пор металлом оказывается выше для пленок с высокоупорядоченной структурой: более 55 % для темплатов АОА 40В и не превосходит 45% для темплатов АОА 120В. Экспериментально установлено, что при электрокристаллизации Вi из электролита, содержащего 0,1 моль/л $\text{Vi}(\text{NO}_3)_3$, формируются дефектные наноструктуры с множественными перешейками, что приводит к разрушению нанонитей при их извлечении из матрицы. Увеличение концентрации $\text{Vi}(\text{NO}_3)_3$ до 0,4 моль/л способствует уменьшению числа перешейков и увеличению прочности Вi нитей.

После оптимизации условий электроосаждения и растворения матрицы получены единичные нанонити Вi с фактором геометрической анизотропии более 100, пригодные для проведения экспериментов по изучению их магнеторезистивных характеристик.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №№ 13-02-91058-НЦНИ_а и 14-08-00838.

Мультиферроик Fe-Al:BaTiO₃: синтез, структура, свойства

П.А Горбатова., В.В Парфенов., Е.В Воронина., А.С. Храмов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

В рамках данной работы выполнен синтез композитных мультиферроиков на основе керамики титаната бария. В качестве магнитной составляющей использован сплав Fe-Al (70:30), полученный металлургическим методом - плавкой в вакууме при $T=1700$ °С. Исследованы дифрактограммы полученных образцов, их магнитные и сегнетоэлектрические свойства.

На дифрактограмме композита Fe-Al+BaTiO₃ (20:80) основные рефлекс соответствуют структуре перовскита, в которой кристаллизуется титанат бария. Наряду с этим при углах $44,3^\circ$ и $64,4^\circ$ проявляются линии, соответствующие сплаву Fe₃Al.

Из измерений температурной зависимости диэлектрической проницаемости образцов видно, что они обладают сегнетоэлектрическими свойствами (рис.1). Величина диэлектрической проницаемости композитов примерно в 1,5 раз меньше диэлектрической проницаемости титаната бария (полученного по керамической технологии).

Изучены магнитные свойства полученных образцов (рис.2). Величина коэрцитивной силы для композита Fe-Al+BaTiO₃ $H_c=10.18$ мТ, величина магнитного момента насыщения $I_{\max}=7.24 * 10^{-5}$ А*м²/кг.

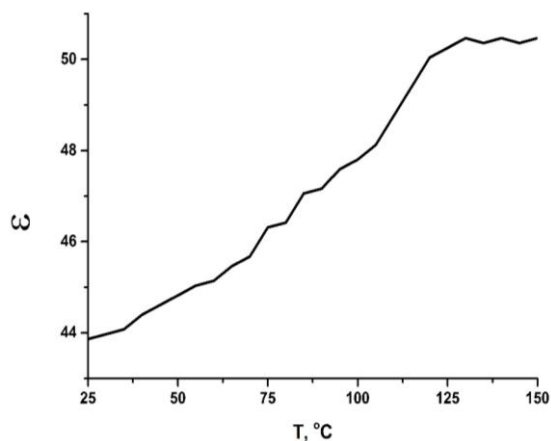


Рис.1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости Fe-Al+BaTiO₃

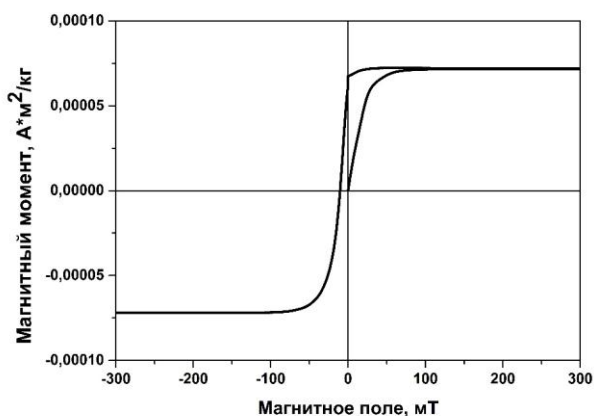


Рис.2. Магнитные свойства Fe-Al+BaTiO₃

Синтез и исследования мезоструктуры прозрачных стекол на основе диоксида циркония

Н.Н. Губанова¹, Г.П. Копица¹, К.В. Ездакова¹, А.Е. Баранчиков², В.К. Иванов²,
А. Feoktistov³, V. Pipich³, V. Ryukhtin⁴, B. Angelov⁵

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия

³ Forschungszentrum Jülich GmbH, Garching, Germany

⁴ Neutron Physics Institute ASCR, Prague, Czech Republic

⁵ Nuclear Physics Institute, ASCR, Řež near Prague, Czech Republic

Прозрачные стёкла на основе аморфного диоксида циркония считаются крайне перспективными материалами для создания фотохромных устройств, каталитических систем, химических сенсоров. Так же, эти материалы можно использовать в качестве матрицы для термостойких люминесцентных нанокмозитов и нелинейных оптических устройств, лазеров.

В данной работе были впервые синтезированы прозрачные пористые стекла на основе диоксида циркония, не содержащие стеклующего компонента – диоксида кремния. Методами: малоуглового и ультра малоуглового рассеяния нейтронов, малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, низкотемпературной адсорбции азота, рентгенофазового анализа, спектроскопии комбинационного рассеяния, растровой микроскопии, а также термического анализа – были исследованы структура и физико-химические свойства стекол на основе диоксида циркония, синтезированных с помощью золь-гель метода из органических растворов пропилата циркония (IV), с использованием азотной кислоты в качестве одного из гидролизующих компонентов.

Комплексный анализ полученных данных показал [1], что:

1. Все образцы являются рентгеноаморфными и характеризуются высокой удельной поверхностью до 250 м²/г.

2. Все полученные стекла представляют собой системы с трехуровневой иерархической организацией структуры. 1-й структурный уровень составляют первичные частицы диоксида циркония с размерами $d_1 \approx 1$ нм, из которых – на 2-м структурном уровне – формируются фрактальные кластеры с размерами $d_2 \approx 24 \div 52$ нм. На 3-м структурном уровне образуются крупномасштабные ($d_3 \approx 2$ мкм) агрегаты, обладающие «диффузной» поверхностью.

3. Как температура синтеза, так и концентрация H₂O в исходном растворе оказывают существенное влияние на структурные характеристики стекол.

Работа выполнена при поддержке программ Президиума РАН № 24.

1. Н.Н. Губанова, Г.П. Копица, К.В. Ездакова и др. Принята в печать в «Поверхность. Рентгеновские, нейтронные и синхротронные исследования» (2014).

**Особенности спектра низкочастотного рассеяния света в
халькогенидных стеклообразных
полупроводниках As-Se-S и As-Se-Te, легированных самарием**

Г.А.Исаева, Р.И.Алекберов, С.И.Мехтиева, А.И.Исаев, Г.Д.Гусейнов

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

В настоящей работе проведены исследования низкочастотного спектра КРС систем As-Se-S и As-Se-Te, легированных самарием. Такие исследования позволят получить информацию о структуре материала в нанометровом пространственном масштабе, а также влиянии на нее легирования самарием:

Установлено, что спектры комбинированного рассеяния света (КРС) халькогенидных стеклообразных полупроводниковых (ХСП) материалов As-Se-S и As-Se-Te при частотах ниже 100 см^{-1} состоят из двух участков: первый – где интенсивность с ростом частоты до $30\div 40 \text{ см}^{-1}$ уменьшается (квазиупругое рассеяние – КУРС); второй – где наблюдается широкая полоса с максимумом в районе частот $\sim 63\div 67 \text{ см}^{-1}$ (бозонный пик - БП). Такое положение отсутствует в соответствующих кристаллах. Наблюдаемые особенности связываются с релаксационными процессами и с избыточной плотностью состояний акустических колебаний, локализованных в неоднородностях материала размером порядка нанометра. Показано, что вклад различных видов рассеяний в низкочастотный спектр зависит от степени неупорядоченности материала, который меняется с изменением химического состава и легированием.

Возникновение БП в стеклообразных и аморфных веществах и отсутствие указанного пика в соответствующих кристаллах свидетельствуют об избыточной плотности колебательных состояний (ПКС) в стеклообразных веществах в акустической области спектра, возникающей, в результате отсутствия трансляционной симметрии в них [1]. Интенсивность БП зависит от степени неупорядоченности материала и изменяется с изменением химического состава и степени легирования. Для нелегированных As-Se-Te интенсивность БП больше чем у As-Se-S, но легирование самарием приводит к уменьшению её в As-Se-Te и увеличению в As-Se-S. Полученные результаты объяснено различной химической активностью элементов, входящих в исследованные ХСП составы, вследствие чего размеры молекул в As-Se-S больше чем в As-Se-Te.

1. О.А.Голикова, Средний порядок и оптоэлектронные свойства тетраэдрически координированного гидрированного аморфного полупроводника, ФТП, 25, (2001)1370-1375

Стеклокомпозитный сцинтиллятор для детектирования нейтронов

Г.А. Досовицкий¹, М.В. Коржик², А.Е. Досовицкий¹

¹ *НеоХим, ЗАО, Москва, Россия*

² *Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Беларусь*

Дефицит на рынке ^3He привел к резкому повышению его стоимости и снижению доступности нейтронных детекторов на его основе, что стимулировало разработку альтернативных решений. Одной из наиболее распространенных альтернатив являются сцинтилляционные детекторы на основе ^6Li -содержащих стекол, которые обеспечивают эффективность регистрации нейтронов аналогичную детекторам на ^3He [1], а также на порядок более быстрый отклик. Основным недостатком литиевых стекол является ограничение по увеличению выхода сцинтилляций, что обусловлено природой переноса возбуждений в аморфных средах.

Представляемый стеклокомпозитный сцинтиллятор является новым поколением нейтронно-чувствительных материалов на основе стекол [2,3]. Благодаря выбору состава стекла и режима его термообработки в стеклообразной матрице формируются наноразмерные включения с высокой степенью кристалличности. Это приводит к повышению выхода сцинтилляций и сдвигу спектра эмиссии в длинноволновую область по сравнению с аморфным стеклом.

Материал обладает выходом сцинтилляций до 8000 фотонов/нейтрон, временем затухания 70 нс и высокой температурной стабильностью световых выходов; пластина толщиной менее 5 мм обеспечивает регистрацию 99% нейтронов. Стеклокомпозитный сцинтиллятор может быть получен в виде пластин различной формы и в виде оптического волокна, что позволяет рассматривать различные конструкции детекторов на его основе, в том числе – обладающих позиционной чувствительностью. Предлагаемый материал может рассматриваться как эффективная замена гелиевым детекторам для решения исследовательских и прикладных задач.

1. “The ^3He supply crisis and alternative techniques to ^3He based neutron detectors for neutron scattering applications”, Rep. on meeting at FRM II, Munich, 7-8 Jul. 2009
2. A.E. Dosovitskiy, G.A. Dosovitskiy, M.V. Korjik, “Development of the new generation of glass-based neutron detection materials”, SPIE Optics + Photonics, San Diego CA, USA, 12-16 Aug. 2012
3. A.E. Dosovitskiy, G.A. Dosovitskiy, M.V. Korjik, “New generation of glass-based neutron detection materials”, Science and Scientists @ ESS, Berlin, Germany, 16-20 Apr. 2012

Эволюция структуры аэрогеля на основе ZrO_2 , полученного методом сверхкритической сушки в гексафторизопропанол, в процессе термической обработки

*К.В. Ездакова¹, Н.Н. Губанова¹, Г.П. Копица¹, А.Е. Баранчиков²,
В.К. Иванов², Ю. Кибалин¹, С.А. Лермонтов³, А.Н. Малкова³,
V. Pipich⁴, N. Szekely⁴, B. Angelov⁵*

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³ Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, Россия

⁴ Heinz-Maier-Leibnitz Zentrum, Garching, Germany

⁵ Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic

Аэрогели – твердофазные материалы, получаемые методом сверхкритической сушки, структура которых представляет собой связную сетку из соединенных между собой наночастиц (2–5 нм), характеризующуюся крайне высокой пористостью. Данные материалы обладают рядом уникальных физических свойств, в том числе низкой плотностью и теплопроводностью [1].

Основной целью настоящей работы являлось исследование структуры аэрогеля на основе ZrO_2 , полученного методом сверхкритической сушки в гексафторизопропанол (ГФИП), а также ее эволюции в процессе термической обработки. Применение ГФИП в качестве растворителя было обусловлено его уникальными свойствами: высокой растворяющей способностью, высокой полярностью и кислотностью, а также низкими значениями критической температуры и давления ($t_{\text{крит}} = 189^\circ\text{C}$, $P_{\text{крит}} = 3.02$ МПа) [2]. Ранее было показано [3], что состав и микроструктура аэрогелей, приготовленных с использованием ГФИП, существенно отличаются от аэрогелей приготовленных с использованием этанола – наиболее часто используемого растворителя для сверхкритической сушки, и обладают существенно более высокой площадью поверхности.

Изучение влияния температуры отжига T_a на структуру аэрогеля на основе ZrO_2 проводилось с применением методов УМУРН, МУРН, МУРР, РФА, БЭТ и ТГА. Анализ данных МУР показал, что на масштабе от 1 до 1000 нм как исходный аэрогель, так и продукты его отжига представляют собой системы с многоуровневой иерархической организацией структуры. Согласно результатам РФА, отжиг при $T_a = 400^\circ\text{C}$ приводит к кристаллизации исходного образца с образованием двух фаз: моноклинной ($m\text{-}ZrO_2$) и оксофторида. Дальнейший рост T_a приводит к исчезновению оксофторида при 500°C и переходу части моноклинной фазы ZrO_2 ($m\text{-}ZrO_2$) в тетрагональную ($t\text{-}ZrO_2$) при 600°C .

1. Aerogels Handbook. Editors Aegerter M.A., Leventis N., Koebel M.M. Springer New York Dordrecht Heidelberg London, 2011, 932 P.
2. I. A. Shuklov, N. V. Dubrovina, Ar. Börner / SYNTHESIS 2007, No. 19, pp 2925–2943
3. S. Lermontov, A. Malkova, L. Yurkova, et al. / J. Supercrit. Fluids. In press.

Синтез порошков титанатов висмута и упорядоченных нанокompозитов на основе опаловых матриц и $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ со структурой пирохлора

С.Н. Ивичева, С.В. Куцев, Ю.Ф. Каргин

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

Разработан новый метод синтеза титанатов висмута разных структурных типов основанный на золь-гель и алкоксотехнологии с использованием многоатомных спиртов. Предложенный метод синтеза титанатов висмута

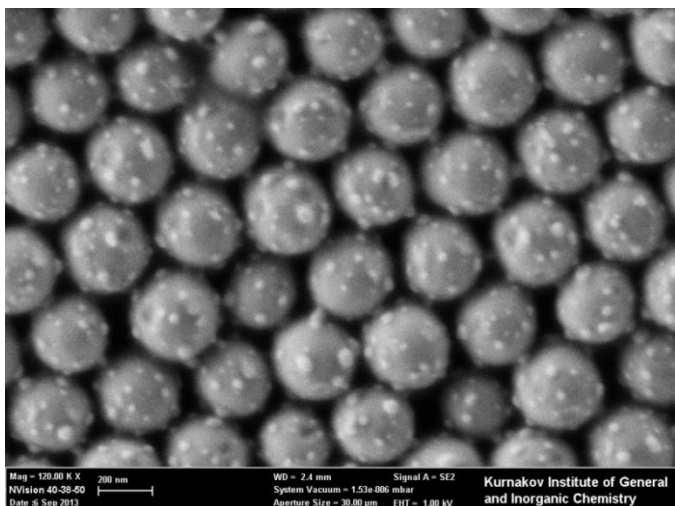


Рис. Электронная микрофотография упорядоченного композита на основе ОМ и титаната висмута со структурой пирохлора

позволяет понизить температуру начала формирования целевого продукта в порошках $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ – до 500°C и 3D- нанокompозитах на основе опаловых матриц (ОМ) ОМ/ $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ – до 600°C и значительно сократить время синтеза. Установлено, что в упорядоченных нанокompозитах образование фазы дититаната висмута со структурой пирохлора становится доминирующей, независимо от соотношений $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2=2/3$ или $1/2$, что очевидно связано с влиянием размерного фактора

на фазовый состав формирующихся титанатов висмута в порошках и поровом пространстве ОМ, как нанореакторах процесса фазообразования. То есть, фаза пирохлора $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ обладает большей термодинамической устойчивостью, по сравнению с фазой $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$, когда частицы дититаната висмута высокодисперсны, что удастся достичь, используя методы «мокрой» химии. Поэтому фазу дититаната висмута не удалось обнаружить, используя твердофазный метод синтеза, и она не была зафиксирована на фазовой диаграмме системы $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ [1].

Синтезированные порошки, образцы керамики на основе двойных систем оксида висмута (III) и оксида титана, и упорядоченные нанокompозиты могут быть использованы в производстве пьезо- и сегнетоэлектрических, оптических, сцинтилляционных материалов.

1. Сперанская Е.И., Рез И.С., Козлова Л.В., Скориков В.М. и др. Изв. АН СССР, Неорган. Материалы, 1965. Т. 1, №2, с. 232-235.

Влияние кристаллографической ориентации алюминия на упорядочение пор в анодных оксидных пленках

Д.С. Кошходаев, И.В. Росляков, К.С. Напольский

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

Идеальную структуру оксидных пленок, получаемых анодным окислением металлического алюминия в разбавленных растворах кислот, можно представить как набор цилиндрических каналов, расположенных перпендикулярно подложке и образующих плотнейшую гексагональную сетку в плоскости пленки. Однако подобное упорядочение пористой структуры наблюдается лишь в узком интервале напряжений анодирования и при использовании в качестве электролита строго определенных кислот. Природа данного явления до сих пор не ясна, ровно как неизвестны до конца движущая сила и механизм процесса упорядочения, что может быть связано с одновременным влиянием многих факторов на рост оксидной пленки, а также с отсутствием подходящих методов исследования процесса упорядочения на количественном уровне.

Целью настоящей работы является анализ дефектности пористых оксидных пленок, формируемых анодированием монокристаллов алюминия с различной кристаллографической ориентацией при различных напряжениях, а также поиск причин формирования упорядоченной пористой структуры лишь в узком интервале условий эксперимента.

В работе методами статистической обработки данных растровой электронной микроскопии проведен систематический анализ дефектности структуры оксидных пленок, полученных анодированием монокристаллов алюминия с ориентацией (111) в 0,3 М растворе щавелевой кислоты при напряжениях от 20 до 140 В. Установлено, что в случае упорядоченной структуры, формирующейся при напряжениях 40, 120 и 140 В, ряды пор имеют выделенное направление ориентации, близкое к кристаллографическому направлению [110] подложки. Подобная взаимосвязь пористой структуры оксидных пленок с кристаллографической структурой алюминиевой подложки является следствием анизотропии скоростей травления различных граней элементарной ячейки металла в процессе анодного окисления.

В рамках работы планируется количественная аттестация пористых структур, полученных анодированием монокристаллов алюминия с различной кристаллографической ориентацией, с помощью метода малоугловой дифракции рентгеновского (синхротронного) излучения.

Нанонити родия: синтез, структура и функциональные свойства

А.П. Леонтьев, К.С. Напольский, О.А. Брылёв

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

В современном мире мы всё чаще и чаще сталкиваемся с такими опасными веществами, как нитраты и нитриты, угарный газ, оксиды азота. Нейтрализовать их действие возможно с применением катализаторов, способствующих разложению вредных веществ. Таким катализатором во многих реакциях может выступать родий [1]. Из-за дороговизны этого металла актуальной задачей является синтез структур с высокой удельной площадью поверхности и каталитической активностью. Вышеуказанными свойствами могут обладать массивы нанонитей [2].

Целью настоящей работы стала разработка метода получения высокоэффективных катализаторов на основе массивов одномерных наноструктур родия для разложения азотсодержащих соединений.

Нанонити родия были получены методом темплатного электроосаждения. В качестве матрицы использовали пористые пленки анодного оксида алюминия (АОА) с высокоупорядоченной структурой, синтезированные путем двухстадийного анодирования в 0,3 М растворе щавелевой кислоты при 40 В. Для серии образцов расстояние между порами составляло $D = 100 \pm 5$ нм, диаметр пор равнялся $d = 45 - 65$ нм.

Металл электрохимически осаждали в матрицу АОА из раствора, содержащего 0,5 М NaCl + 0,01 М Na_3RhCl_6 . В процессе экспериментов варьировали потенциал и заряд, протекающий в ходе осаждения, толщину темплата (от 30 до 60 мкм) и его пористость. Были получены нанонити родия длиной от 2 до 9 мкм и диаметром 50 ± 5 нм с большой удельной поверхностью (до 28 м²/г). Фактор шероховати для большинства образцов превысил 1000, составив для некоторых из них 2700. Для повышения химической инертности катализатора был проведен отжиг матриц АОА при 800 °С. Каталитическая активность полученных наноструктур Rh была измерена в реакции электровосстановления нитрат-анионов в растворах 0,5 М H_2SO_4 + 0,005 М NaNO_3 и 1 М NaCl + x М NaNO_3 (x=0; 0,1; 1).

Высокая каталитическая активность полученных образцов, а также инертность матрицы из отожжённого АОА, делает массивы нанонитей Rh перспективным материалом для разложения нитратов, нитритов и других вредных соединений. Разработанные катализаторы могут успешно использоваться как в кислой, так и в нейтральной и щелочной средах.

1. G. Jerkiewicz, J. Borodzinski, et al., Langmuir. 9, 8 (1993).
2. K.S. Napolskii, P.J. Barczuc, et al., Electrochimica Acta. 7910, 52 (2007).

Исследование механической стабильности и упругих свойств тугоплавких материалов при экстремальных воздействиях

А.В. Луговской, М.П. Белов, И.Ю. Мосягин, О.М. Красильников, Ю.Х. Векилов

НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

В работе рассматривается исследование механической стабильности тугоплавких металлов и сплавов на их основе при экстремальных воздействиях (высоких температурах и давлениях).

Для исследования механической стабильности при высоких давлениях ($T=0$ К), сравнимых по величине с объемным модулем упругости, используется методика, основанная на теории фазовых переходов Ландау с учетом эффектов нелинейной упругости. Для получения необходимых для применения методики величин разработана техника компьютерных расчётов упругих постоянных (УП) порядка $n \geq 2$ на основе теории функционала плотности. Также для анализа динамической и электронной стабильности исследуемых металлов дополнительно проводится расчёт кривых фононной дисперсии в высокосимметричных направлениях и плотности электронных состояний. В рамках представленного подхода проанализирована стабильность тугоплавких металлов в широком интервале давлений: Ta, Ru, Mo, W. Так ОЦК Ta и ГПУ Ru остаются стабильными в диапазонах давлений 0-800 ГПа и 0-600 ГПа соответственно и не демонстрируют возможности нестабильности с дальнейшим ростом давлений. ОЦК Mo демонстрирует смягчение упругой постоянной \tilde{C}' при давлениях $P > 400$ ГПа что в совокупности с нестабильностью соответствующей этой УП ветви поперечных фононных колебаний приводит к фазовому переходу ОЦК \rightarrow ДГПУ. При исследовании стабильности ОЦК W также наблюдается смягчение упругих модулей и фононных частот. Полученные в ходе исследования данные хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Сведения о нестабильности ОЦК фаз W и Mo находят подтверждение в исследованиях других авторов, выполненных методами отличными от представленного.

Для исследования механической стабильности металлов и сплавов при высоких температурах ($P \sim 0$ GPa) используется метод первопринципной молекулярной динамики. Значения упругих постоянных второго порядка, необходимых для проверки критериев механической стабильности, находятся из соотношения напряжение-деформация (закон Гука). В качестве объектов исследования выбраны Ru и сплавы с памятью формы на его основе.

Исследование выполнено в рамках проекта, поддержанного грантом Российского Фонда фундаментальных исследований № 13-02-00338 А, под руководством профессора, д.ф.-м.н Векилова Ю.Х. и с.н.с., д.ф.-м.н. О.М. Красильникова.

Взаимодействие гетерогенных тонких пленок в системе Tl–Fe–S

А.И. Мададзада^{1,2}, Э.Б. Аскеров¹, Д.И. Исмаилов², Р.Н. Мехтиева³

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

³ *Институт радиационных проблем НАНА, Баку, Азербайджан*

Теория и экспериментальные методы, используемые при изучении фазообразования в результате взаимодействия гетерогенных пленок, наравне со специфическими особенностями и природой химических элементов исследуемой системы, определяются также и способом их получения. Исследования процессов образования фаз и фазовых превращений в высокодисперсных и тонкопленочных материалах возможны лишь методом дифракции электронов высоких энергий и в особенности методом кинематической электронографии.

В системах Tl – S и Fe – S, являющиеся двойными сечениями тройной системы Tl–Fe–S отмечены соединения следующих составов: Tl₂S с параметрами решетки гексагональной сингонии $a=1.220$; $c=1.817$ нм, ПГС R₃. Tl₄S₃ с периодами моноклинной решетки $a=0.787$; $b=0.776$; $c=1.303$ нм, ПГС P2₁/a. Фазы составов TlS и TlS₂ кристаллизуются в тетрагональной сингонии с периодами решеток $a=0.779$; $c=0.680$ нм, ПГС I4/mcm и $a=2.320$; $c=5.480$ нм, ПГС P4₂/nmc соответственно. Кристаллические характеристики соединения Tl₂S₅, существующее в красной и черной формах и кристаллизующееся в двух модификациях ромбической структуры таковы: Tl₂S₅(красн.) $a=0.666$; $b=0.652$; $c=1.675$ нм, ПГС P2₁2₁2₁, Tl₂S₅(черн.) $a=2.345$; $b=0.888$; $c=1.057$ нм, ПГС Pbcn. В диаграмме состояния системы Fe–S, обнаружена существования соединений FeS и FeS₂, кристаллизующиеся в ромбической и кубической модификациях, соответственно. При рекристаллизации поликристаллических пленок моноклинного TlFeS₂ в интервале 473 – 483 К в результате деформирования первичной фазы образуется моноклинная решетка вторичной фазы TlFeS₂ с периодами $a=1.168$; $b=0.532$; $c=1.053$ нм, $\beta=144.60$. Закон погасания дифракционных рефлексов показывает, что вторично образующаяся фаза также как и первичная, описывается с ПГС C12/m1.

В результате взаимодействия гетерогенных конденсатов, полученных одновременным испарением компонентов системы Tl–Fe–S, фазообразование происходит формированием как аморфных так и кристаллических фаз. В аморфном состоянии формируется также двойной сульфид тройного соединения TlFeS₂. При рекристаллизации первично образующейся фазы моноклинного TlFeS₂ с периодами $a=1.1755$; $b=0.5340$; $c=0.6960$ нм, $\beta=116,91$, ПГС C12/m1 при температуре 483 К происходит фазовое превращение с образованием термодинамически более устойчивой вторичной фазы TlFeS₂.

Наблюдение спин-волнового резонанса в системе $\text{GdMnO}_3/\text{SrTiO}_3$

*Д.В. Мамедов², Р.М. Ерёмкина^{2,1}, Т.П. Гаврилова¹, И.В. Яцык¹,
И.И. Фазлижанов¹, В.И. Чичков³*

¹ Казанский физико-технический институт КНЦ РАН, Казань, Россия

² Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

³ НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

В последнее время наблюдается всё более возрастающий интерес к мультиферроикам, веществам в которых сосуществуют магнитное и сегнетоэлектрическое упорядочения, где магнитные и электрические степени свободы связаны между собой. Интерес к ним обуславливается не только новыми физическими свойствами таких веществ, но и возможностью управления их состоянием посредством внешних магнитных или электрических полей.

Целью данной работы являлось исследование магнитных свойств тонкоплёночного GdMnO_3 на подложке SrTiO_3 ($\text{GdMnO}_3/\text{SrTiO}_3$) методом магнитного резонанса. GdMnO_3 является мультиферроиком ниже 42 К, а SrTiO_3 проявляет сегнетоэлектрические свойства ниже 100 К. Нами проведены исследования спектров магнитного резонанса тонкой пленки 100 нм GdMnO_3 на подложке SrTiO_3 толщиной 1 мм в области от 40 К до 100 К. В спектре регистрируются две группы линий. Одна обменно-суженная от подсистемы ионов марганца и гадолиния. При температуре 100 К ширина этой линии порядка 2000 Э, при понижении температуры уширяется, при 48 К достигает ~ 8000 Э (рис.1). В температурном диапазоне от 40 К до 100 К в спектрах магнитного резонанса также наблюдается группа линий спин-волнового резонанса, интенсивность которых возрастает при увеличении магнитного поля, а при понижении температуры уменьшается ширина и увеличивается интенсивность линий спин-волнового резонанса. Данное поведение, вероятно, обусловлено зависимостью диэлектрической проницаемости SrTiO_3 от температуры в диапазоне от 40 К до 100 К.

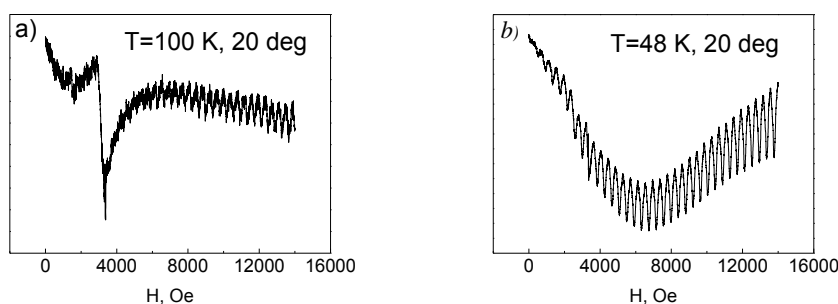


Рис. 1. Вид спектров ЭПР при температурах а) 100 К и б) 48 К.

Особенности магнитной структуры квазиупорядоченных сплавов $Fe_{1-x}Al_x$ ($x=30-35$ ат.%) с добавками Ga, V, V и Mn

*А.Е. Масленникова¹, Е.В. Воронина¹, Е.П. Елсуков², А.В. Королев³,
А.К. Аржников²*

¹ Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

² Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

³ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В работе представлены результаты рентгеноструктурных, полевых (до 9 Т) и температурных мессбауэровских и магнитометрических исследований (5–300 К) бинарных $Fe_{1-x}Al_x$ ($x=30-35$ ат.%) и тройных упорядоченных $Fe_{65-y}Al_{35-x}M_{x,y}$ сплавов с примесью Ga, V, V и Mn ($x, y = 0, 5, 10$ ат.%).

Материалы были получены с помощью специальной термообработки разупорядоченных нанокристаллических сплавов, предварительно синтезированных механосплавлением. Все образцы представляли собой однофазные объекты с DO_3 или $B2$ -сверхструктурой. Максимальное изменение параметра ОЦК решетки составило 0.2% для сплавов с добавкой 10 ат.% Ga (увеличение) и V (уменьшение).

Анализ результатов магнитометрии показал, что система магнитных моментов сплавов $Fe_{65}Al_{35}$ и $Fe_{65}Al_{35-x}Ga_x$ ($x=5,10$) характеризуется двумя различными магнитными состояниями с существенно отличающимися гистерезисными циклами и значениями динамической магнитной восприимчивости. Значения температуры и внешнего магнитного поля, при которых происходит переход из одного состояния в другое, выше в сплавах с примесью Ga по сравнению с исходным сплавом. Влияние примесей на параметры мессбауэровских спектров обсуждается.

Наблюдение в упорядоченных сплавах $Fe_{100-x}Al_x$ ($x \geq 34$ ат.%) [1] несоизмеримой волны спиновой плотности методом рассеяния нейтронов, анализ данных магнитометрии свидетельствуют о том, что в условиях однородности структуры и химического состава в системе формируются пространственно-неоднородные магнитные состояния. Введение в двойной упорядоченный сплав $Fe_{65}Al_{35}$ примесей Ga, V или Mn, вызывающее изменение параметра решетки и числа электронов в d-зоне, направлено на исследование общих и частных особенностей температурного и полевого поведения магнитных характеристик этих сплавов. Обсуждается возможность интерпретации результатов магнитометрии и мессбауэровской спектроскопии в рамках признаков магнитного фазового расслоения.

Работа поддержана РФФИ (грант № 12-02-01316-а).

1. D.R. Noakes, A.S. Arrott, et al., Phys. Rev. Lett., 91, 217201-1 (2003).

Комплексное исследование кинетики окисления нанопленок титана

В.А. Матвеев, О.В. Геращенко, Н.К. Плешанов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Исследования пленок титана толщиной от нескольких до десятков нанометров представляют особый интерес в связи с их широким применением при создании устройств спинтроники, микро и наноэлектроники, а также в качестве оптических покрытий [1], металлических контактов и “high-k” диэлектриков для МОП-технологии нового поколения [2, 3]. Одно из перспективных применений - создание поляризующих покрытий нейтронной оптики нового поколения, позволяющих эффективно поляризовать даже ультрахолодные нейтроны [4]. При уменьшении толщины пленок все большую роль имеет состояние межфазовой границы - поверхности, поскольку число поверхностных атомов становится сравнимым с общим числом атомов в системе. В этих условиях сильное влияние на физические свойства материала оказывает окисный слой, формирующийся при контакте пленки с атмосферой.

В представленной работе проведено комплексное исследование кинетики окисления нанопленок Ti толщиной от 5 до 100 нм. Образцы получались с помощью магнетронного напыления на стеклянные подложки, а затем окислялись в атмосфере воздуха при температуре от 20 до 300°C. Толщины и шероховатости слоев металла и оксида определялись методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии.

Установлено, что при комнатных температурах более тонкие пленки титана окисляются на большую глубину, однако прослойка металла сохраняется даже у самых тонких (5 нм) образцов. Этот результат был подтвержден прямым методом измерения электросопротивления пленок. Повышение температуры приводит к увеличению толщины окисного слоя, при этом кинетическая кривая роста толщины оксида хорошо описывается логарифмическим законом. Характерное насыщение роста окисного слоя при фиксированной температуре указывают на применимость известной модели Кабрера-Мотта [5] для окисления металлов.

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

1. Klemberg-Sapieha J.E., Oberste-Berghaus J., Martinu L. et al. // Applied Optics. 2004. V. 43. № 13. P. 2670-2679.
2. Udeshi D., Maldonado E., Xu Yu., et al. // J. Appl. Phys. 2004. V. 95. №8. P. 4219-4222.
3. Wilk G.D., Wallace R.M., Anthony J.M. // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. №10. P.5243-5275.
4. Pleshanov N.K. // Nucl. Instrum. Methods A. 2010. V. 613. №1. 15-22.
5. Cabrera N., Mott. N. F. // Rep. Prog. Phys. 1949. 12, 163.

Исследование зависимости толщины тонких пленок аморфного кремния от давления синтеза

Д.М. Митин¹, В.А. Александров^{1,2}, А.А. Сердобинцев^{1,2}

¹ Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

² Саратовский филиал ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Саратов, Россия

Аморфный кремний (a-Si) широко применяется в устройствах электроники и оптоэлектроники. Ввиду этого развитие методов получения тонких плёнок a-Si и исследование их свойств является одной из актуальных задач. В работе исследована зависимость толщины пленок a-Si, полученных методом магнетронного распыления на постоянном токе, от давления в рабочей камере.

Плёнки a-Si были синтезированы на подложках из ситалла при следующих параметрах: ток разряда 100 мА, время напыления 15 мин. Варьируемый параметром было давление рабочего газа (аргона), которое изменялось в пределах от $7,5 \cdot 10^{-5}$ до 10^{-3} Торр. Для определения толщины пленок использовался профилометр Veeco Dektak150. Полученные результаты представлены в виде графика зависимости толщины пленки от давления синтеза (рис.1, а).

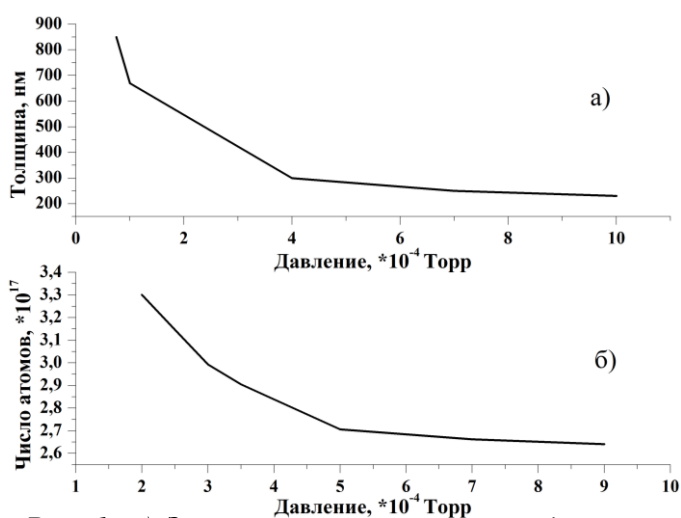


Рис. 1. а) Зависимость толщины от давления; б) зависимость распыленных в секунду атомов мишени от давления

давления синтеза (рис.1, а).

На графике хорошо видно, как с ростом давления газа в рабочей камере уменьшается толщина пленки. Это можно объяснить следующим образом. Увеличение давления газа вызывает уменьшение напряжения между анодом и катодом магнетрона. Таким образом, с увеличением давления происходит уменьшение коэффициента распыления материала мишени за счет снижения энергии

бомбардирующих ионов. Этот факт подтверждается полученной теоретически зависимостью числа распыленных в секунду атомов мишени от давления, изображенной на рис. 1,б.

Полученные сведения об изменении толщины пленок a-Si в зависимости от давления синтеза могут быть полезными при проектировании тонкопленочных структур и устройств на их основе.

Магнитные свойства многослойных пленочных экранов при разных ориентациях внешнего магнитного поля

*С.С. Муравьев-Смирнов¹, К.Ф. Власик¹, С.С. Грабчиков², В.М. Грачев¹,
В.В. Дмитренко¹, Н.П. Калашников¹, П.В. Ньют¹, С.Е. Улин¹, З.М. Утешев¹*

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, Россия*

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

В работе исследованы магнитные свойства многослойных пленочных экранов (МПЭ) цилиндрической конфигурации на основе NiFe/Cu [1].

Изучаемые образцы были получены методом электролитического осаждения [2]. Многослойные образцы представляли собой чередующиеся слои NiFe и Cu, осажденные на алюминиевых цилиндрах диаметром 4 см и длиной 13 см с толщиной стенок 0,15 см. Толщина ферромагнитных слоев варьировалась от 10 до 150 мкм, а толщина слоев Cu была равна 5 мкм. Было испытано пять образцов, в которых изменялось количество ферромагнитных слоев от 3 до 45, а медных – от 2 до 44.

Магнитные свойства образцов исследовали, помещая их в однородное магнитное поле, создаваемое с помощью катушек Гельмгольца, которые позволяли изменять индукцию в диапазоне от 0 до 2,5 мТл. Зависимость индукции магнитного поля от расстояния до центра экрана измерялась с помощью датчиков Холла при разных ориентациях внешнего магнитного поля: поле параллельно, либо перпендикулярно к оси цилиндрического экрана. Эффективность экранирования оценивали с помощью отношения $\mathcal{E} = B_0 / B$, где B_0 – магнитная индукция в защищаемой области пространства при отсутствии экрана, B – магнитная индукция при его наличии.

В работе установлено, что (i) МПЭ обеспечивают значения $\mathcal{E} = 8 \div 10$ в диапазоне полей от 0,1 до 1 мТл; и значения $\mathcal{E} = 80 \div 100$ в диапазоне полей от 2 до 4 мТл, что в 4–5 раз лучше, чем для экрана, изготовленного из пермаллоя толщиной 500 мкм марки 80НХС; (ii) МПЭ более эффективно (в 1,5–10 раз) экранируют постоянные внешние магнитные поля в диапазоне от 0,1 до 2,5 мТл при ориентации поля перпендикулярно к оси цилиндрического экрана, чем при продольной ориентации внешнего магнитного поля.

1. С.С. Грабчиков, Л.Б. Сосновская, Т.Е. Шарапа. Многослойный электромагнитный экран // Патент РБ № 11843 от 2009.01.28.
2. С.С. Муравьев-Смирнов, С.С. Грабчиков и др. Многослойные магнитные экраны на основе пленочных наноструктур. // Машиностроение и инженерное образование. 2011. № 4. С. 24-29.

Влияние исходного состава медно-бериллиевого сплава на величину магнитоэластического эффекта при старении в постоянном магнитном поле

Ю.В. Осинская, А.А. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Ранее авторами [1] был установлен устойчивый эффект заметного возрастания микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2 после старения в постоянном магнитном поле (ПМП), который, в соответствии с представлениями [2,3], можно отнести к разновидности магнитоэластического эффекта (МПЭ) в металлических сплавах. Поскольку пластические свойства сплава при этом уменьшаются, наблюдаемый эффект можно классифицировать как «отрицательный» post МПЭ в диамагнитных металлических сплавах с магнитной памятью [4]. Дальнейшее исследование кинетических закономерностей проявления эффекта в модельных бинарных Cu-Be сплавах [5, 6], выявили неординарную роль Ni в формировании МПЭ. В данном сообщении дается краткий обзор новых данных по влиянию легирующих добавок Ni на кинетику процессов искусственного старения бинарных Cu-Be сплавов в ПМП.

Анализ полученных экспериментальных данных показывает, что 1) наложение ПМП всегда приводит к увеличению микротвердости до ~35 %, т.е. наблюдается «отрицательный» МПЭ; 2) увеличение добавки Ni в сплаве от 0.4 до 1.0 вес. % приводит к непропорциональному увеличению микротвердости Cu-Be сплава; 3) причиной возникновения МПЭ и «магнитной памяти» в Cu-Be сплавах является атомарная перестройка атомов на стадии фазообразования [4] при искусственном старении в ПМП, и можно предположить, что 4) увеличение микротвердости сплава связано с тем, что наличие примеси Ni приводит при старении в ПМП к формированию более эффективных препятствий для движения дислокаций.

Полученные результаты стимулируют интерес к дальнейшей разработке механизмов формирования МПЭ, в частности, к поиску магнитных корреляций и форм кластеризации примеси Ni в немагнитной матрице Cu-Be сплавов нейтронными методами.

1. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев ФХОМ **3**, 18 (2003).
2. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, ЕА. Петржик. Кристаллография **48**, 838 (2003).
3. Ю.И. Головин. ФТТ **46**, 769 (2004).
4. Р.Б. Моргунов, А.Л. Бучаченко. ЖЭТФ **36**, 505 (2009).
5. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев, А.К. Раджабов, В.В. Рунов. ФТТ **54**, 531 (2012).
6. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. Известия РАН. Серия физическая **77**, 1256 (2013).

Получения и диэлектрические характеристики керамики (Ba_{0.5}Sr_{0.5})Nb₂O₆

А.Г. Абубакаров¹, И.А. Вербенко¹, А.В. Павленко^{1,2}, Л.А. Шилкина¹,
Г.Н. Толмачёв^{1,2}, Л.А. Резниченко¹, И.М.Алиев¹, С.Х.Алихаджиев¹

¹Научно-исследовательский институт физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

²Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия

Ниобаты бария (BaNb₂O₆) и стронция (SrNb₂O₆) являются перспективными материалами для использования в современной микроэлектронике. Однако сложная структура вольфрамовых бронз, к которым относятся вышеуказанные среды, полиморфизм BaNb₂O₆, неизоморфность ему SrNb₂O₆ ограничивают ряд твердых растворов (ТР) на их основе. Это, а также многоступенчатость процессов образования ТР системы (Ba_{1-x}Sr_x)Nb₂O₆, делают проблематичным изготовление их без примесей посторонних фаз, что существенно затрудняет применение ТР данной системы. В связи с вышесказанным представляются актуальными оптимизация условий приготовления и установление закономерностей формирования структуры и диэлектрических свойств BaNb₂O₆, SrNb₂O₆ и ТР Ba_{0.5}Sr_{0.5}Nb₂O₆, что и стало целью данной работы.

Анализ зависимости относительных интенсивностей линий примесных фаз исследуемых объектов от температуры обжига при синтезе ($T_{\text{синт.1}}$) показал, что с ростом $T_{\text{синт.1}}$ содержание примеси в BaNb₂O₆ существенно снижается, а при синтезе двойного ниобата стронция максимальной беспримесности удаётся достичь при $T \sim 1250$ °С. Отсутствия примесей в Ba_{0.5}Sr_{0.5}Nb₂O₆ можно достичь при $T \sim 1250$ °С. Полученный ТР образуется в тетрагональной сингонии и имеет параметры элементарной ячейки $a = 12.355$ Å, $c = 3.896$ Å. Выбор температур спекания ($T_{\text{сп}}$) на серии проб, обжигаемых при (1300 ÷ 1400) °С, показал, что оптимальными являются $T_{\text{сп}} = (1375 \div 1400)$ °С. При исследовании диэлектрических характеристик керамики Ba_{0.5}Sr_{0.5}Nb₂O₆, спеченной при $T_{\text{сп.}} = 1400$ °С, установлено, что при комнатной температуре на частоте $f = 10^4$ Гц относительная диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon/\varepsilon_0$, равна 900, а тангенс угла диэлектрических потерь, $\text{tg } \delta$, - 0.05. С ростом температуры формируются максимумы на кривых $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$ и $\text{tg } \delta(T)$ при $T = (90 \div 110)$ °С, соответствующие области перехода из сегнетоэлектрической (СЭ) в параэлектрическую (ПЭ) фазу, смещающиеся при увеличении частоты, f , в область более высоких температур. Наблюдаемое поведение $\varepsilon/\varepsilon_0(T, f)$ и $\text{tg } \delta(T, f)$ в окрестности СЭ→ПЭ фазового перехода (ФП) позволяет отнести исследуемый объект к СЭ с размытым ФП, что согласуется с данными других авторов. В рамках работы продемонстрирована возможность получения тонких пленок Ba_{0.5}Sr_{0.5}Nb₂O₆ из керамических мишеней, полученных при установленных оптимальных режимах.

Исследование поверхностных ионов как потенциальных носителей информации методом ИК спектроскопии

С.Н. Петров, А.А. Цыганенко

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время в большинстве устройств применяется оптический способ записи информации, основанный на оптическом излучении. Недостатков у этого способа почти нет, но при использовании молекулярного способа записи информации, основанного на явлении изомерии ионов $(\text{NC})^-$ или молекул CO , плотность записи информации возможно увеличить на один-два порядка, что является существенным выигрышем.

В данной работе исследован фундаментальный аспект применимости ионов молекулы HCN в записи информации, рассчитана энергия активации этого иона для перевода его из состояния $(\text{NC})^-$, которое является энергетически наиболее выгодным в состоянии $(\text{CN})^-$, которое менее выгодно.

Для получения иона была произведена адсорбция молекул HCN , которые в определенных условиях диссоциируют с образованием иона $(\text{NC})^-$. Методом ИК спектроскопии удастся наблюдать ион, регистрируя его частоту колебания. Кроме этого при нагревании удалось получить изомерные формы иона.

Влияние гидрирования на структуру и свойства соединения NbSe₂, интеркалированного 3d-металлами разной валентности.

С.Ю. Подчерцев¹, Н.В. Селезнева¹, Е.М. Шерокалова¹, П.Б. Терентьев²,
Н.В. Баранов^{1,2}

¹ Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

С практической точки зрения большой интерес представляют гидриды на основе слоистых дихалькогенидов 3d-переходных металлов. В литературе имеется только несколько работ по гидрированию матриц NbSe₂ [1] и TaS₂ [2]. Известно, что интеркаляция данного класса соединений атомами (молекулами) разного сорта приводит к значительному изменению их физических свойств. В данной работе было изучено влияние гидрирования на структуру и свойства соединений типа Me_xNbSe₂ (Me = Cr, Ag; x = 0.05, 0.1, 0.33).

Для получения образцов использовался метод твердофазного ампульного синтеза. Гидрирование осуществляли на аппарате типа «Сивертса» при давлении водорода p = 16.5 МПа в течении 7 часов при температуре T = 630К. Рентгенографическая аттестация образцов проводилась на дифрактометре Bruker AXS D8 ADVANCE (CuK_α-излучение). Магнитные измерения выполнялись на SQUID-магнитометре типа MPMS фирмы QUANTUM DESIGN, измерение температурных зависимостей электрического сопротивления образцов проводилось стандартным 4-х контактным способом на постоянном токе в диапазоне температур 5 – 350 К на установке с использованием автономного криостата замкнутого цикла CryoFree204.

Гидрирование матрицы NbSe₂ приводит к увеличению объема элементарной ячейки на ΔV ≈ 3%. Установлено, что устойчивые гидриды образуют соединения с 2H модификацией, т.е. с малой концентрацией внедренных атомов. Гидрирование соединения Cr_{0.1}NbSe₂ повышает температуру перехода в состояния типа спинового стекла в 2 раза и увеличивает объем элементарной ячейки на 1.5%, для гидрида Ag_{0.1}NbSe₂ - рост объема составил ΔV ≈ 2.7%, что также меньше, чем для матрицы. При концентрации x = 0.33 происходит смена политипа с 2H на 4H, гидрирование соединений не приводит к заметным изменениям параметров элементарных ячеек и физических свойств соединений Cr_{0.33}NbSe₂ и Ag_{0.33}NbSe₂.

1. Obolensky M. A., Chashka Kh. B., Beletsky V. I., Besteev A. V. and Solovey V.V. Hydrogen in layer structures.// Int. J. Hydrogen Energy. 1993. Vol. 18, No. 3, pp. 217-222.
2. Wrigh C.J., Riekel C., Schollhorn R. and Tofield B.C. Incohernt Neutron Spectra of H_xTaS₂, a Nonstoichiometric Covalent Tantalum Hydrosulfide// J. of Solid State Chemistry. 1978. Vol 24 219-225.

Применение количественного металлографического анализа для изучения структуры биотитового гнейса

М.Ю. Потапкина

Тульский государственный университет, Тула, Россия

Данные о микроструктуре и гранулометрическом составе биотитового гнейса и их сравнение с полученными статистическими распределениями зернового состава с различными математическими моделями, описывающими распределение размеров частиц при дроблении, дает возможность выдвинуть теорию об условиях, протекавших при формировании этих пород.

Целью проведения металлографического анализа образца биотитового гнейса было: выявить размеры структурных составляющих, с последующим статистическим анализом для установления вида распределения размеров частиц и получить сведения об однородности и морфологических особенностях данной породы. Материалом исследования является биотитовый гнейс, состав которого по данным рентгеноструктурного анализа: кварц – 36,8 %; биотит – 24,5 %; плагиоклаз – 38,7 %; сульфид железа менее 1 %.

Аншлифы для исследования были приготовлены в нескольких сечениях (продольное и поперечное сечение). В продольном сечении некоторые частицы имеют вытянутую форму и ориентированы в одном направлении. Наблюдается и сильное отличие полей зрения по содержанию минералов, особенно это касается кварца.

Для оценки структуры использовали параметрический метод количественной металлографии, заключающийся в измерении площади сечения зерна. Измерения проводили автоматическим анализатором на снимках структур подготовленных с помощью программы Adobe Photoshop CS3. Подготовка заключалась в прорисовке границ структурных составляющих, заливке включений, чтобы они не попадали в выборку в качестве исследуемой структурной составляющей.

По данным проведенного количественного металлографического анализа среднее содержания биотита в образце составило 22,07 %. Статистический анализ полученных данных, выявил, что коэффициент вариации содержания биотита в различных полях зрения составляет 34,09 %, коэффициент вариации площадей сечения зерен составляет около 100 %, а распределение площадей зерен по размерам может быть описано трехпараметрическим логнормальным законом распределения.

Полученные результаты показывают, что биотит распределен по объему образца неоднородно, а его частицы имеют сильно отличающиеся размеры. Выявлен вид закона распределения площадей сечения частиц, далее при сравнении с модельными данными может быть сделан вывод о виде распределения истинных размеров частиц в объеме.

Структура и электрофизические свойства керамик системы $\text{NaNbO}_3\text{-KNbO}_3\text{-CuNb}_2\text{O}_6$

М.В. Таланов

Научно-исследовательский институт физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

Свинцоводержащие пьезокерамики на основе бинарных систем $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$, $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ и $\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-PbTiO}_3$ являются широкоиспользуемыми материалами при создании различного рода преобразователей, актюаторов и датчиков. Однако они содержат более 50 мас. % свинца – крайне токсичного элемента. На сегодняшний день создание альтернативных пьезоэлектрических материалов, не содержащих свинец, является одной из ключевых задач физического материаловедения. Одними из перспективных бессвинцовых пьезоэлектрических материалов являются керамики на основе бинарной системы $(\text{Na}, \text{K})\text{NbO}_3$ (KNN), характеризующиеся относительно высокими значениями пьезоэлектрических коэффициентов ($d_{33} \sim 100$ пКл/Н). Однако, для применения в устройствах силовой пьезотехники и УЗ-приборах необходимо значительное повышение механической добротности (Q_m) этих материалов. Одним из возможных путей решения указанной проблемы является модифицирование керамик. Так, в [1] сообщалось, что введение 1 мол. % CuNb_2O_6 в твердые растворы KNN позволяет получить керамики с сочетанием высоких параметров пьезоэлектрической активности и механической добротности. Целью данной работы явилось установление особенностей фазообразования и формирования электрофизических характеристик керамик трехкомпонентной системы $\text{NaNbO}_3\text{-KNbO}_3\text{-CuNb}_2\text{O}_6$ в области больших концентраций CuNb_2O_6 (2,5-7,5 мол. %).

Результатом работы стала построенная фазовая диаграмма изучаемой системы в области больших концентраций CuNb_2O_6 . Кроме того, были выявлены наиболее перспективные составы керамик с высокими значениями целевых параметров $K_p=0.21\text{-}0.32$, $Q_m =500\text{-}1000$. Полученные материалы могут быть использованы в электронной технике, устройствах медицинской диагностики, системах УЗ-отчистки и в промышленных системах розжига.

В докладе представлено более подробное описание полученных результатов.

1. M.-R. Yang, S.-Y. Chu, C.-C. Tsai, J. Alloys Comp. 507, 433 (2010).

Фрактальные модели кластеров в анализе малоуглового рассеяния наноалмазами

А.В. Томчук^{1,2}, М.В. Авдеев¹, Л.А. Булавин²

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

Различные формы детонационных наноалмазов (ДНА) характеризуются кластерной организацией, что отчетливо наблюдается в малоугловом рентгеновском и нейтронном рассеянии [1-3]. Соответствующие области степенного рассеяния на спектрах могут быть обработаны в рамках универсального экспоненциально-степенного приближения [4], что позволяет проследивать изменения фрактальных параметров наноалмазных кластеров при вариации ряда внешних условий. Изучаются масштабно-инвариантные свойства нескольких теоретических моделей, имитирующих рост фрактальных кластеров. Исследуются двух- и трехмерные случаи, как для детерминистических, так и для стохастических фракталов, состоящих из наночастиц конечных размеров с учетом эффектов полидисперсности. Анализируются предлагаемые в литературе теоретические и эмпирические модели описания рассеяния на фракталах [5]. Демонстрируется принципиальная возможность извлечения информации о лакунарности из малоугловых данных.

1. A. E. Aleksenskii, M. V. Baidakova, A. Ya. Vul', V. I. Siklitskii, Phys. Solid State. 668, 41 (1999).
2. M. V. Avdeev, V. L. Aksenov, L. Rosta, *Diamond Related Mater.* 2050, 16 (2007).
3. M. V. Avdeev, N. N. Rozhkova, V. L. Aksenov, V. M. Garamus, R. Willumeit, E. Osawa, J. *Phys. Chem. C* 9473, 113 (2009).
4. G. Beaucage, *J. Appl. Cryst.* 134, 29 (1996).
5. P.W. Schmidt, *J. Appl. Cryst.* 414, 29 (1991).

Центры с редокс-переключаемыми парамагнитными свойствами в неинноцентных комплексах ионов переходных металлов

Н.А. Тукмакова¹, С.О. Стрекалова¹, К.В. Холин^{2,3}, М.К. Кадиров^{2,3}

¹ Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

² Институт органической и физической химии КНЦ РАН, Казань, Россия

³ Казанский национальный исследовательский университет, Казань, Россия

Неинноцентные комплексы переходных металлов привлекают внимание исследователей благодаря интересным спектроскопическим и химическим свойствам, обусловленным возможностью создания форм комплексов с неспаренными электронами, их способностью к переносу заряда между металлом и лигандом. Вследствие этого валентность центрального металла может меняться под воздействием температуры, света.

В данной работе рассмотрены комплексы молибдена $(Et_3NH)(Bu_4N)[Mo_3S_7(dhbq)_3]$, рения $[(C_{36}H_{40}N_2)Re(CO)_3Br]$ и хрома $[Cr(bpy)_3](ClO_4)_3$.

В ходе эксперимента активно применялись методы циклической вольтамперометрии, детектируемой электронным парамагнитным резонансом, (ЦВА ДЭПР) и времяразрешенной ЦВА ДЭПР, которые успешно дополнили исследования электрохимического окисления и восстановления комплексов Mo, Re, Cr.

Для комплекса хрома $[Cr(bpy)_3](ClO_4)_3$ удалось впервые зарегистрировать спектр парамагнитного продукта в низкоспиновом состоянии, который возникает в результате ряда гетерогенных переносов электрона на комплекс $[Cr(bpy)_3]$ и показать его образование именно на четвертом пике восстановления. При восстановлении рений-дииминного комплекса $[(C_{36}H_{40}N_2)Re(CO)_3Br]$ было обнаружено изменение констант СТВ неспаренного электрона с ядрами рения и азота в зависимости от количества перенесённых электронов.

1. К. П. Бутин, Е. К. Белоглазкина, Н. В. Зык, Успехи химии 74, 6 (2005).

Теплофизические свойства стеклообразующих сплавов $Al_{86}Gd_6PM_8$

С.А. Упоров, В.А. Быков, С.В. Пряничников

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Синтезированы и аттестованы образцы сплавов $Al_{86}Gd_6PM_8$ (где ПМ = Cu, Ni, Co, Fe, Mn, Cr, Ti, Zr, Mo, Ta), определен их фазовый состав.

Для всех сплавов определены температуры структурных (полиморфных) превращений в кристаллическом состоянии, двухфазной области и точки плавления. С помощью метода лазерной вспышки (LFA) впервые были получены экспериментальные данные о ряде теплофизических свойств изученных стеклообразующих сплавов – температуропроводности и теплопроводности, а также теплоемкости в широком интервале температур $T = 300 - 900$ К. Методом гидростатического взвешивания была определена пикнометрическая плотность образцов при комнатной температуре. Температурные изменения плотности были учтены путем дополнительных измерений термического расширения образцов методом дилатометрии. Используя экспериментально определенные величины плотности, термического расширения, теплоемкости и температуропроводности были рассчитаны абсолютные значения теплопроводности изученных сплавов.

Для всех изученных сплавов выявлено наличие эффектов сильного переохлаждения точки ликвидус $\Delta T = 50 - 80$ К, что характерно для сплавов с высокой стеклообразующей способностью.

Полученные температурные зависимости температуропроводности и теплопроводности сплавов $Al_{86}Gd_6PM_8$ демонстрируют сильные немонотонные зависимости. Абсолютные значения указанных транспортных характеристик существенно ниже в 3-5 раз в сравнении с чистым алюминием.

Наблюдаемые экспериментальные особенности изученных сплавов могут быть вызваны значительным химическим взаимодействием (вероятно, частично ковалентного типа) между атомами алюминия и легирующими 3d- и 4f- переходными элементами. Наличие сильной sp-d (возможно и sp-d-f) гибридизации электронов должно неизбежным образом отражаться на механизме переноса тепла и заряда, что и наблюдается для данных сплавов экспериментально.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Свердловской области (грант № 13-02-96036 урал_a).

Мезоструктура порошков $Gd(OH)CO_3 \cdot xH_2O$ с частицами сферической формы заданного размера

И.Г. Чувашова¹, А.С. Ванецев², Г.П. Копица³, А.Е. Баранчиков^{1,4}, В. Angelov⁵

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

² Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia

³ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

⁴ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

⁵ Institute of Macromolecular Compounds, Prague, Czech Republic

Монодисперсные частицы контролируемой формы и размера находят широкое применение при создании оптических и магнитных материалов. В последнее время стабильные суспензии монодисперсных частиц используются для адресной доставки лекарств и в качестве биологических меток. На данный момент существует ряд подходов к синтезу монодисперсных коллоидных частиц, наиболее перспективные из которых связаны с использованием метода гомогенного осаждения (для частиц неорганических веществ) и техники эмульсионной полимеризации (для полимерных материалов).

Целью настоящей работы явилось установление зависимости микро- и мезоструктуры порошков гидроксокарбоната гадолиния, характеризующегося частицами сферической формы и получаемого в ходе гомогенного осаждения нитрата в присутствии мочевины при микроволновом воздействии, от параметров синтеза.

В ходе настоящей работы была изучена микроморфология и мезоструктура порошков $Gd(OH)CO_3 \cdot xH_2O$, полученных высокотемпературным микроволновым гидролизом водных растворов нитрата гадолиния в присутствии мочевины при различных рН исходного раствора. В качестве основного метода исследования использовали малоугловое рассеяние рентгеновского излучения (диапазон от 0,06 до 11 nm^{-1}). Выявили условия синтеза, при которых происходит получение порошков $Gd(OH)CO_3 \cdot xH_2O$ с заданным размером частиц в диапазоне 50-500 нм.

Шликерное литье – метод создания фотонных стекол

*А.П. Чумаков¹, А.В. Чумакова¹, А.А. Мистонов^{1,2},
Н.В. Саполетова³*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

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

Впервые методом шликерного литья были получены фотонные стекла и определена их структура. Традиционно фотонные стекла получают методом вертикального осаждения или седиментации из коллоидного раствора, используя при этом частицы двух диаметров. Шликерное литье представляет собой метод формования изделий из концентрированной суспензии порошка в жидкости на стенках гипсовой формы. В данной работе мы использовали коллоидный раствор монодисперсных сферических частиц диаметром 200 ± 10 нм, которые были осаждены на стенку гипсовой камеры и впоследствии перенесены на стеклянную подложку.

Образцы были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и ультрамалоугловой дифракции синхротронного излучения на установке ВМ-26 Европейского центра синхротронного излучения (ESRF).

В начальный момент времени осаждения сферические частицы образуют разупорядоченный массив, однако по мере уменьшения скорости всасывания растворителя в гипсовую форму, формируются зерна с плотнейшей шаровой упаковкой частиц. Методом СЭМ установлено, что зерно состоит из упорядоченных плотно упакованных гексагональных слоев, выходящих на поверхность пленки плоскостями (111), (100), (110). Средний диаметр частицы, по данным СЭМ, составил 203 ± 5 нм, а размер зерна – 3,5 мкм. Толщина пленки зависит от расположения стенки камеры, на которой она осаждалась и варьируется от 450 до 600-мкм. При исследовании данных образцов методом малоугловой дифракции синхротронного излучения были получены типичные картины дифракции поликристалла. Установлено, что положения пиков на зависимости интенсивности рассеяния от переданного импульса составляет $Q_{(111)} = 0,0346 \pm 0,0002 \text{ нм}^{-1}$ и $Q_{(220)} = 0,0583 \pm 0,0002 \text{ нм}^{-1}$, что соответствует отражениям от плоскостей (111) и (220) для ГЦК структуры с параметром решетки $a_0 = 290 \pm 3$ нм. Средний размер зерна, определяемый из FWHM, составляет 1,5 мкм, что соответствует 8-9 слоям.

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

Исследование кристаллической структуры синтетических алмазов, легированных бором, полученных при высоком давлении и температуре

Ф.М. Шахов¹, А.А. Красилин¹, С.В. Кидалов¹, В.Т. Лебедев², К. Така³

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

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

³ *Hosei University, Hosei, Japan*

При высоком статическом давлении (5 ГПа) и высокой температуре (1500-1600 °С) из смеси графита (50 вес%) с металлом-катализатором (50 вес% NiMn) [1,2] с добавлением аморфного бора (до 5 вес%) синтезированы алмазы, легированные бором. Размер кристаллов от 40 мкм до 120 мкм. Введение бора в реакционную шихту значительно понижает переход графита в алмаз.

Алмазы, легированные бором, обладают полупроводниковыми свойствами. При высоких концентрациях атомов бора в кристаллической решетке алмаза, в алмазах может наблюдаться переход в сверхпроводящее состояние при температуре ~2 К. Характерная длина когерентности 100 нм.

Кристаллическая структура синтезированных алмазов исследовалась методами сканирующей электронной микроскопии, дифракции рентгеновских лучей, малоугловым рассеянием нейтронов [3] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией.

По корреляции «параметр кристаллической решетки - содержание бора» [4] определена концентрация бора, которая достигает 1 ат%. Однако, область когерентного рассеяния рентгеновских лучей для таких алмазов составляет 50 нм, а радиус инерции алмазных агрегатов 37.2 нм. По величинам этих параметров можно, предварительно, констатировать, что в таких алмазах перехода в сверхпроводящее состояние не будет.

Работа поддержана грантом РФФИ 12-02-00108-а.

1. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov, V.M. Davidenko, V.A. Yashin, I.E. Bogomazov, A.Ya. Vul'. *Tech. Phys. Lett.* 34(8) (2008) 640-642.
2. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov, V.M. Davidenko, V.A. Yashin, I.E. Bogomazov, A.Ya. Vul'. *Phys. Solid State.* 50(5) (2008) 981-985.
3. S.V. Kidalov, F.M. Shakhov, V.T. Lebedev, D.N. Orlova, Yu.S. Grushko. *Crystallography Reports.* 56(7) (2011) 1181-1185.
4. V.V. Brazhkin, E.A. Ekimov, A.G. Lyapin, S.V. Popova, A.V. Rakhmanina, S.M. Stishov, V.M. Lebedev, Y. Katayama, K. Kato. *Phys. Rev. B* 74 (2006) 140502(R).

Исследование поведения критических полей в зависимости от толщины структурированных и сплошных плёнок на основе кобальта и никеля

*И.С. Шишкин¹, А.А. Мистонов¹, Н.А. Григорьева¹, Д. Менцель²,
Н.А. Саполетова³, К.С. Напольский³, А.А. Елисеев³, С.В. Григорьев^{1,4}*

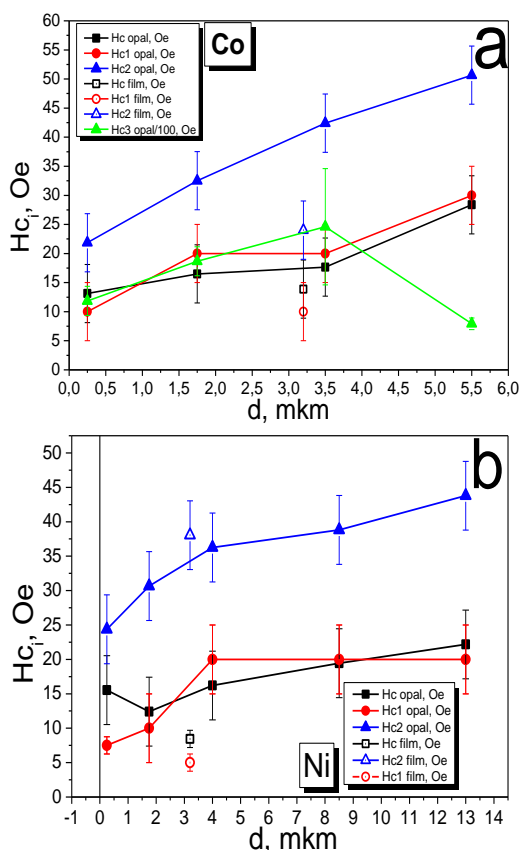
¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Institute of Condensed Matter Physics, Braunschweig, Germany

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

⁴ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Объектом исследования являлись структурированные ферромагнитные инвертированные опалоподобные и сплошные плёнки на основе кобальта и никеля толщиной от 250 нм до 13 мкм, синтезированные методом электрохимического осаждения Ni, или Co в поры искусственного опала, сформированного из полистирольных микросфер, упорядоченных в ГЦК структуру с периодом решетки $a_0 = 720 \pm 20$ нм, с последующим удалением опаловой матрицы.



Зависимость величины критического поля от толщины образца на основе кобальта (a) и никеля (b)

слоями в образцах. В то же время, поле насыщения возрастает с ростом толщины образца до 1 мкм, затем убывает, что свидетельствует о наличии перехода от двумерной структуры образца к трёхмерной.

Измерения в геометрии малоуглового рассеяния нейтронов позволили сделать вывод, что намагниченность в инвертированных опалах имеет неоднородное распределение, которое представляет собой совокупность 4 магнитных подсистем, каждая из которых направлена вдоль одной из осей типа $\langle 111 \rangle$ ГЦК структуры. Методом SQUID – магнитометрии были измерены зависимости полной намагниченности образцов различной толщины от величины внешнего магнитного поля. При анализе данных общая зависимость была разделена на две составляющие: магнитомягкую и магнитожёсткую. Для каждой из составляющих были определены критические поля, соответствующие точкам перемагничивания, полученным из анализа SANS данных. Было выявлено, что все критические поля, кроме поля насыщения возрастают с увеличением толщины, что свидетельствует о наличии связи между

Секция «Структура и свойства материалов»

Нелинейность диэлектрических откликов бессвинцовых сегнетопъезокерамических материалов на основе бинарной системы $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$, модифицированных оксидами 3d-металлов, при воздействии постоянных электрических полей и температуры.

А.Г. Абубакаров, Х.А. Садыков, И.А. Вербенко

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

Отказ от использования крайне токсичных соединений свинца при производстве сегнетопъезокерамических материалов (СПКМ) является одной из приоритетных задач современного материаловедения. Перспективным кандидатом для замены твёрдых растворов (ТР) классических свинецсодержащих систем может стать керамика на основе системы $\text{NaNbO}_3 - \text{KNbO}_3$. Настоящая работа посвящена детальному изучению влияния оксидов 3d-металлов на диэлектрические спектры и поведение реверсивной относительной диэлектрической проницаемости ТР на основе $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$ в высоких электрических полях. В качестве объектов выбраны ТР указанной системы, в которые сверхстехиометрически вводили MnO_2 , NiO и CuO в количествах (1÷3) масс. %.

Всем изученным материалам свойственны экстремальные диэлектрические спектры, характерные для сегнетоэлектриков. При температуре $\leq 280^\circ\text{C}$ спектры практически линейны с близкой к нулевой дисперсией $\varepsilon/\varepsilon_0$, что свидетельствует о высокой температурной стабильности свойств изученных материалов. Анализ диэлектрических спектров также позволил установить, что более стабильными диэлектрическими характеристиками (с меньшей дисперсией $\varepsilon/\varepsilon_0$ и величинами $\text{tg}\delta$) обладают керамики, спечённые при $T = 1190^\circ\text{C}$.

В ходе работы установлено существенное влияние модификаторов на происходящие под влиянием высокого электрического поля процессы. Установлено, что характер полученных зависимостей определяется при малом содержании модификаторов, главным образом, формированием анизотропных структур при спекании материала, а при увеличении концентрации оксидов 3d-металлов внедрением модификаторов в А- и В-подрешётки с образованием анионодефектных структур и, как следствие, увеличением сегнетожёсткости.

Обращает на себя внимание резкое увеличение (более, чем в 3 раза) гистерезиса $\varepsilon/\varepsilon_0(E)$ при поляризации ТР, модифицированного 3 масс. % MnO_2 , что может использоваться для создания адаптивных электромеханических преобразователей. Устойчивость же диэлектрических характеристик и низкая $\varepsilon/\varepsilon_0$ в неполяризованных керамиках делают также возможным их применение в качестве высокочастотных конденсаторов.

Перенос заряда в монокристаллах CuGaS_2

Х.В. Алигулиева, Н.А. Абдуллаев, И. Гасымоглу, С.А. Исмиева, Т.Г. Керимова

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

Сложные соединения типа $A^I B^III C^{VI}_2$ ($A^I = \text{Cu, Ag}$; $B^III = \text{Ga, In}$; $C^{VI} = \text{S, Se, Te}$) со структурой халькопирита уже длительное время привлекают внимание исследователей в связи с перспективами их практического применения в качестве элементов преобразователей солнечной энергии и эффективных излучающих светодиодов [1-3]. В настоящее время интерес к этим соединениям возрос в связи с развитием спинтроники, в которой доминирующей концепцией получения разбавленных магнитных полупроводников (РМП) является введение в диамагнитный полупроводниковый материал магнитной примеси, например: Mn, Fe, Co, Cr и др. [4]. Интересной фундаментальной особенностью соединений типа $A^I B^III C^{VI}_2$, и CuGaS_2 в частности, является взаимодействие $3d$ -состояний металла (Cu) с валентными p -состояниями аниона (S), приводящего к их гибридизации (смешиванию) и возмущению структуры электронно-энергетических полос [5]. С этим явлением связаны особенности энергетического спектра: значительно меньшая ширина запрещенной зоны в CuGaS_2 (~2,5 эВ) в сравнении с его бинарным аналогом ZnS (~3,82 эВ) [6], немонотонное изменение ширины запрещенной зоны с температурой $E_g(T)$ [7], отрицательное спин-орбитальное расщепление (-0,016 эВ для CuGaS_2 [8]), и др.

Монокристаллы CuGaS_2 были получены нами методом Бриджмена-Стокбаргера. На рисунке 1 приведены результаты исследований дифракции рентгеновских лучей (а), проведенные нами на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Advance, и кристаллическая структура CuGaS_2 (b)..

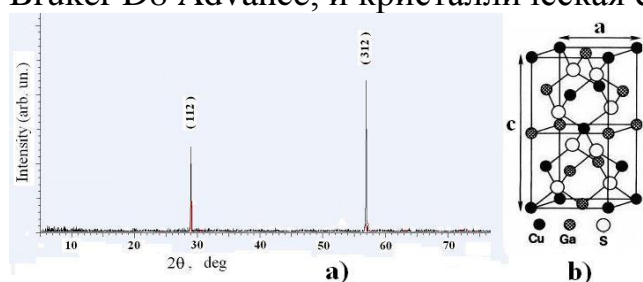


Рис. 1. Рентгенодифрактограмма (а) и кристаллическая структура (b) монокристаллов CuGaS_2 .

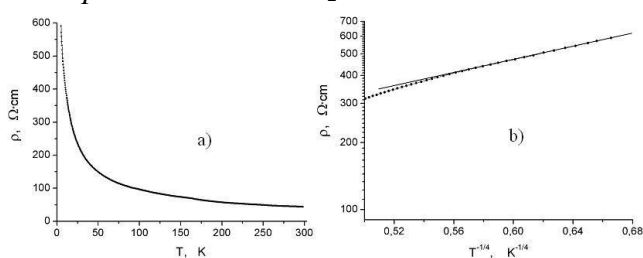


Рис. 2. Температурная зависимость удельного сопротивления

Высокотемпературное рентгенодифрактометрическое исследование полиморфных превращений в монокристаллах AgCuSe

Ю.И. Алыев, Ю.Г. Асадов, А.Г. Бабаев, К.М. Джафаров

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

Синтезированные составы AgCuSe, после того как изучены методом рентгенофазового анализа, помещали в ампулы и с помощью специального механизма помещали внутри печи, имеющей три температурные зоны. В верхней зоне печи поддерживали температуру на 50 К выше, а во второй на 50 К ниже точки плавления соединения AgCuSe ($T_{пл}=1039\text{К}$). В верхней зоне печи состав AgCuSe находился в расплавленном состоянии. Когда острый кончик ампулы переходит точку температуры плавления, со стороны меньшей температуры образуются зародыш кристалла высокотемпературной модификации. Перемещение ампулы со скоростью 0.3 см/час оказалось подходящим для роста образовавшегося зародыша. При дальнейшем смещении ампула, содержащий кристалл высокотемпературной модификации доходит третьей зоны печи, где и происходит превращение в низкотемпературную модификацию.

При комнатной температуре от кристалла AgCuSe в интервале углов $10^\circ \leq 2\theta \leq 90^\circ$ зафиксированы 11 четких дифракционных отражений, которые точно совпадают с отражениям порошкограммы и индицируется на основе параметров орторомбической решетки, т.е. $a=4.104 \text{ \AA}$, $b=20.350 \text{ \AA}$, $c=6.310 \text{ \AA}$, $Z=10$, пр.гр. P4/nmm, $\rho=7.888 \text{ г/см}^3$. После записи дифракционных отражений при комнатной температуре включали печь и через каждые 50 К проводили контрольные записи. Зафиксированные при комнатной температуре 11 дифракционных отражения до температуры 495 К остаются постоянными. При 545 К все 11 дифракционных отражения до температуры 495 К остаются постоянными. При 545 К все 11 дифракционных отражений исчезают и в прежнем интервале углов фиксируются четыре новые отражения от плоскостей с индексами (111), (200), (220) и (311) высокотемпературной ГЦК – модификации с параметрами элементарной ячейки $a = 6.082 \text{ \AA}$, $Z = 4$, пр.гр. Fm3m и $\rho = 7.389 \text{ г/см}^3$.

Температура равновесия между модификациями равна $504 \pm 1 \text{ К}$. Превращения в AgCuSe обратимые и происходят по типу монокристалл-монокристалл. Из температурной зависимости параметры решетки орторомбической и ГЦК модификаций в интервале температур 295-595К рассчитаны коэффициенты теплового расширения. Коэффициенты линейного расширения орторомбической модификации по кристаллическому направлению [010] сильно отличается от $\alpha_{[100]}$ и $\alpha_{[001]}$. Одной из причины нестабильности структуры AgCuSe является сильное анизотропии теплового расширения.

Образование наноструктур в адсорбционном слое на поверхности твёрдого тела в поле лазерного излучения относительно слабой интенсивности

В.В. Андреев

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

Исследовано образование наноструктур в адсорбционном слое на твёрдой поверхности в процессе физической адсорбции частиц на однородную поверхность диэлектрика, полупроводника или металла в поле оптического (лазерного) излучения с неоднородным пространственным распределением интенсивности в поперечном сечении направленного на поверхность излучения. Предполагается, что интенсивность лазерного излучения в поперечном сечении распределена по закону Гаусса. В работе представлены результаты исследования образования неоднородных пространственно-временных структур на однородной твёрдой поверхности в результате нетеплового воздействия лазерного излучения относительно слабой интенсивности. Показано, что пространственно-временные неоднородности в адсорбционном слое могут возникать вследствие латерального взаимодействия диполей, наведённых в адсорбированных частицах под действием лазерного излучения.

Результаты исследования представляют интерес в технологиях создания планарных неоднородных структур различных конфигураций с помощью оптического излучения, например, в микроэлектронике. В частности, возможно их применение при производстве печатных схем с высокой плотностью монтажа, а также масок для фотолитографии. Например, один из способов получения планарных структур определенной конфигурации на поверхности твёрдого тела заключается в изменении времени освещения лазером поверхности материала. Варьируя время действия оптического излучения можно контролировать распределение концентрации адсорбированных на поверхности твердого тела частиц.

Эта работа является продолжением начатых ранее автором исследований [1- 4].

1. V.V. Andreev, G.N. Ostryakov, G.G. Telegin, Chem. Phys. Reports. 16, 1 (1997).
2. В.В. Андреев, Д.В. Игнатъев, Г.Г. Телегин, Квантовая электроника. 34, 2 (2004).
3. В.В. Андреев, Ю.И. Прилуцкий, Доклады НАН Украины. 12 (2004).
4. В.В. Андреев, Синтез наноструктур на поверхности твёрдых тел в поле лазерного излучения слабой интенсивности// Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение: сб. тр. 12-й Междунар. науч. конф.- шк., Саранск, 1- 4 октября 2013 г. / редкол.: К.Н. Нищев (отв. ред.) [и др.]. – Саранск: Изд-во Мордов. ун-та, 2013. – 204 с. (С. 160).

Исследование внутренней структуры сферических частиц диоксида кремния, формирующего фотонные кристаллы и фотонные стёкла.

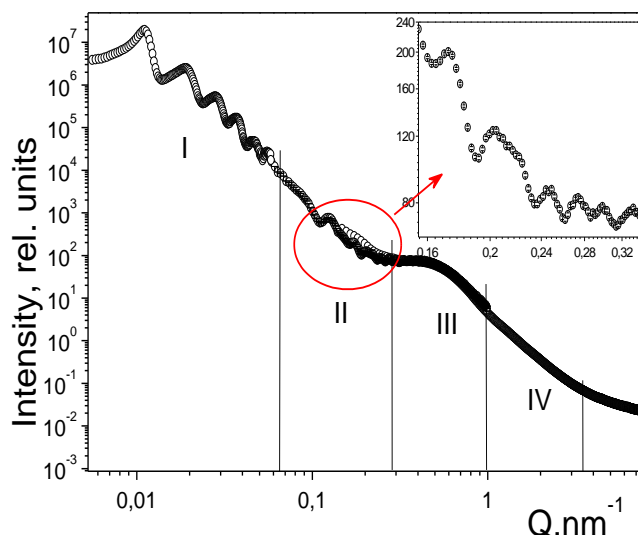
*М.И. Арефьев¹, Н.А. Григорьева¹, А.А. Мистонов¹, К.В. Ездакова²,
Г.П.Копица², С.В. Григорьев^{1,2}*

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

²Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Микрообъекты, синтезированные на основе монодисперсных сферических наночастиц диоксида кремния, интересны из-за возможности их использования в устройствах управления светом [1-4]. Ключевыми факторами для этих объектов являются внутренняя структура частиц и их структурное упорядочение. Для данной работы монодисперсные частицы SiO₂ диаметром D = 250 нм - 2.2 мкм были выращены методом Штобера-Финка [4]. Исследование внутренней структуры сфер проводилось тремя методиками: сканирующей электронной микроскопии, малоуглового рассеяния синхротронного излучения (SAXS) и нейтронов (SANS). Из рисунка видно, что кривая рассеяния состоит из четырех частей: собственно рассеяние на частицах диаметром D 700 нм (область I), рассеяние на частицах диаметром D ~ 30 нм (область II) и D = 14 нм (область III), формирующих внутреннюю структуру наносфер SiO₂, и области, соответствующей рассеянию на плоской фрактальной структуре (область IV). Последнее может быть результатом рассеяния на «рыхлой» поверхности частиц, формирующих внутреннюю структуру SiO₂.

Полученные результаты говорят в пользу иерархической структуры наносфер SiO₂, предсказанной в работе [5].



Зависимость интенсивности синхротронного рассеяния от величины переданного импульса для сферических частиц диаметром 700 нм

1. J. S. Fallert, R. J. B. Dietz, *et al.*, Nature Photonics **3**, 279 (2009)
2. H.E. Türeci, Li Ge, S. Rotter, *et al.*, Science, **320**(5876), 643 (2008).
3. P.D. Garcia, *et al.*, Advanced materials, **22**(1), 12 (2010).
4. W. Stöber, A.Fink, E.Bohn, Journal of Colloid and Interface Science, **26**, 62 (1968).
5. V.M. Masalov, N.S. Sukhinina, E.A. Kudrenko and G.A. Emelchenko, Nanotechnology, **22** (2011) 275718.

**Анализ локальной атомной структуры поверхности сплавов
3d-металлов по данным EELFS спектроскопии:
возможности и ограничения**

О.Р. Бакиева, О.М. Немцова, Д.В. Сурнин

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Одним из способов анализа локальной атомной структуры вещества является метод протяженных тонких структур спектров энергетических потерь электронов - EELFS (Extended Energy Loss Fine Structure). Природа формирования EELFS спектров аналогична XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) - спектры формируются в процессе когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном атомном окружении ионизируемого атома. Поэтому EELFS, как и EXAFS спектры, могут быть использованы как методы анализа локальной атомной структуры вещества. Однако, в отличие от XAFS, где угловая симметрия волновой функции фотоэлектрона определяется дипольным правилом отбора, в EELFS необходимо учитывать мультипольность процесса возбуждения внутреннего уровня атома электронным ударом.

Ранее показано, что спектроскопия протяженных тонких структур спектров энергетических потерь электронов (EELFS – Electron Energy Loss Fine Structure) позволяет получать параметры локальной атомной структуры (длины химических связей, координационные числа, параметры дисперсии межатомных расстояний) в двухкомпонентных системах типа 3d-металл – легкий элемент. При анализе локальной атомной структуры двухкомпонентных сплавов 3d-металлов по данным EELFS спектроскопии возникает проблема перекрытия осциллирующих частей сформированных в процессах возбуждения внутренних уровней обоих химических элементов. В настоящей работе предложено интегральное уравнение на определение атомных парных корреляционных функций в двух компонентной системе с перекрывающимися осциллирующими частями. При этом ядро интегрального уравнения, кроме стандартных функций рассеяния, определяется отношениями соответствующих атомных интенсивностей электронных переходов.

Предложенная методика апробирована в рамках модельных расчетов, на соответствующих протяженных тонких структурах полученных с тестовых образцов (сплавы Cu-Ni, Cu-Mn). Используя принцип трансферабельности параметров обработки EELFS спектров, получены атомные парные корреляционные функции поверхности исследуемых образцов после ионно-лучевой модификации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-31488 и Программы Президиума РАН. Проект №12-П-2-1013.

Нанопроволоки экзотической фазы оксида железа как основа магниторезонансного источника спинового тока

А.И. Дмитриев, О.В. Коплак, Р.Б. Моргунов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

В настоящее время для создания приборов спинтроники требуются источники спинового тока. «Спиновая батарейка» (источник спинового тока) – устройство для инжектирования спиновой поляризации в металл или полупроводник из ферромагнетика – работает при возбуждении ферромагнитного резонанса. Это сильно увеличивает стоимость такого элемента, поскольку требует наличия высокостабильного однородного магнита.

Предлагается воспользоваться уникальными свойствами экзотической эpsilon-фазы оксида железа Fe_2O_3 , магнитный резонанс в которой возбуждается одним лишь сверхвысокочастотным полем без приложения внешнего постоянного магнитного поля.

В недавно выделенных наночастицах этого материала наблюдается сверхвысокое значение коэрцитивной силы (свыше 2.3 Тл), что свидетельствует о высокой стабильности и долговечности таких магнитов и пригодности для создания «спиновых батареек», в которых расщепление уровней создается высокостабильным внутренним магнитным полем, а не внешним магнитом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-1598.2014.3.

Влияние добавок на структуру, фазовый состав и термодинамические свойства легированного оксидного топлива

Н.А. Иванова

НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

Одним из наиболее перспективных путей повышения эксплуатационных характеристик водо-водяных энергетических реакторов является дальнейшее совершенствование состава, структуры и свойств топливных таблеток на основе диоксида урана, а также повышение ресурсных характеристик твэлов путем снижения повреждаемости их оболочек, которая накапливается и проявляется при возникновении в них растягивающих напряжений. Для решения этой проблемы в настоящее время разработано топливо на основе диоксида урана, легированного оксидами алюминия, кремния и ниобия, суммарное содержание которых не превышает 0,4 мас.%. Легирующие добавки обеспечивают снижение сопротивления деформированию топливного сердечника, а также оптимизацию его структуры.

Введение в UO_2 оксидов алюминия и кремния способствует удержанию в топливе ряда продуктов деления, таких как Cs, Ba, Sr и др., образуя с ними стабильные алюмосиликаты.

Поэтому в соответствии с целью работы и поставленными задачами, были изучены термодинамические свойства диоксида урана, содержащего небольшие добавки оксидов алюминия, кремния и ниобия на кислородный потенциал топливных таблеток, который оказывает влияние на повышение глубины выгорания ядерного топлива.

Для определения фазового состава был записан рентгеновский спектр образца в режиме непрерывной съемки, построена штрих-диаграмма и проведен качественный рентгеновский фазовый анализ (РФА), из которого следует, что рентгенограмма образца содержит линии (UO_2), т.е. основная фаза имеет флюоритную решетку, характерную для диоксида урана. Это свидетельствует о том, что примеси либо вошли в состав твердого раствора на основе UO_2 , либо выделились в виде очень мелкодисперсных или стекловидных фаз. Съемка проводилась в дискретном режиме с последующей обработкой результатов по методу наименьших квадратов, а измерение параметра решетки осуществлялось по дифракционным линиям (533) и (622).

Рентгенографический анализ показал, что величина периода решетки легированного образца ($a = 546,90$ пм) ниже значений, соответствующих стехиометрическому составу диоксида урана ($a = 547,07$ пм). Это свидетельствует о растворении ниобия в диоксидной матрице и об образовании равновесного твердого раствора.

$Mn_{1-x}Fe_xSi$ как жидкий кристалл

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

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

На сходство между спиральными магнетиками и жидкими кристаллами было указано в работе [1], где фаза спиновой жидкости, возникающая при подавлении дальнего магнитного порядка, рассматривалась как аналог голубой жидкокристаллической фазы. Используя $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в качестве модельной системы, мы покажем, что аналогия между жидкими кристаллами и спиральными магнетиками оказывается существенно более глубокой. Прежде всего, следует отметить практическое совпадение картины рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов в фазах с промежуточным магнитным порядком у $Mn_{1-x}Fe_xSi$ [2] и в нематических и смектических фазах [3]. Более того, фазовые переходы, предшествующие образованию фазы с дальним магнитным порядком у $Mn_{1-x}Fe_xSi$ [2] можно интерпретировать как фазовые превращения изотропная жидкость – нематик и нематик – смектик и описать в рамках обобщения флуктуационной модели [4] на анизотропный случай, соответствующий последовательному $1D \rightarrow 2D \rightarrow 3D$ упорядочению при понижении температуры. При этом парамагнитная фаза $Mn_{1-x}Fe_xSi$ оказывается аналогом изотропной жидкости, а не кирального газа, как это считалось ранее [1]. Интересно, что выполненное недавно исследование магнитных свойств парамагнитной фазы твердых растворов $Mn_{1-x}Fe_xSi$ с $x < 0.3$ [5] свидетельствует о ее кластерном упорядочении на нанометровой шкале по крайней мере в области $T < 60$ К, что полностью согласуется с предложенной жидкокристаллической интерпретацией. В заключение отметим, что при исследовании магнитной фазовой диаграммы магниторезистивным методом [6] был обнаружен эффект упорядочения спиновой жидкости (голубой фазы) в магнитном поле [7]. Такое поведение может рассматриваться в качестве дополнительного аргумента в пользу жидкокристаллической аналогии.

Работа поддержана программой РАН «Сильно коррелированные электроны» и проектом РФФИ 13-02-00160.

1. S.Tewari, et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 047207 (2006)
2. S. V. Grigoriev, et al., Phys. Rev. B **83**, 224411 (2011)
3. Л.М.Блинов. *Жидкие кристаллы: Структура и свойства*. URSS, 2013.
4. S.V.Demishev, et al., JETP Lett. **98**, 829 (2013)
5. S.V.Demishev, I.I.Lobanova, S.V.Grigoriev, *unpublished*.
6. S.V.Demishev, et al., Phys. Rev. B **85**, 045131 (2012)
7. S.V.Demishev, et al., *Magnetic scattering, spin fluctuations and quantum criticality in $Mn_{1-x}Fe_xSi$ solid solutions*. Abstracts of DMI 2013, Veliky Novgorod, 2013, p. 28

Фазообразование и электрофизические свойства мультиферроиков $\text{Ba}_2\text{LnFeNb}_4\text{O}_{15}$ (Ln = Nd, Sm, Eu)

Д.А. Калганов, И.В. Бычков

ФГБОУ ВПО «Челябинский государственный университет», Челябинск, Россия

Сложные оксиды ниобия $\text{Ba}_2\text{LnFeNb}_4\text{O}_{15}$ со структурой тетрагональных вольфрамовых бронз (ТТВ) проявляют свойства мультиферроиков – наличие магнитного и электрического упорядочения [1]. Значительный научный интерес, представляют исследование структуры и электрофизических свойств таких соединений в области фазовых переходов.

В настоящей работе методом твердофазного синтеза с механической активацией получены поликристаллические образцы состава $\text{Ba}_2\text{LnFeNb}_4\text{O}_{15}$ (Ln = Nd, Sm, Eu). При помощи полнопрофильного анализа рентгеновских дифрактограмм проведены исследования кристаллической структуры в области сегнетоэлектрического фазового перехода (рис. 1).

Получены значения диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь для различных температур в частотном диапазоне 20 Гц - 1 МГц (рис. 2).

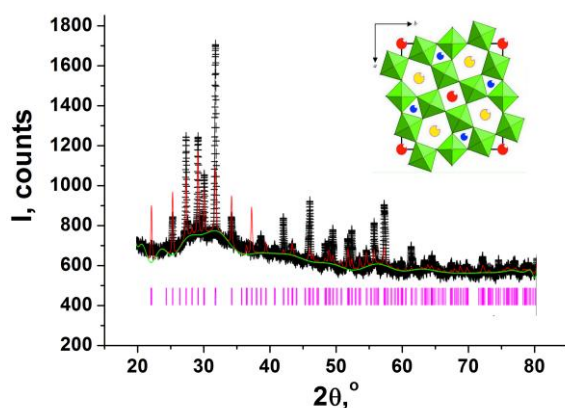


Рис. 1 Кристаллическая структура $\text{Ba}_2\text{SmFeNb}_4\text{O}_{15}$: экспериментальная и расчетная рентгенограммы; вид вдоль оси c

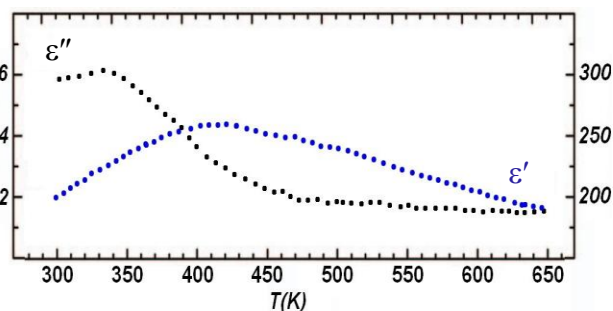


Рис. 2 Температурная зависимость диэлектрической проницаемости и потерь $\text{Ba}_2\text{SmFeNb}_4\text{O}_{15}$ (1 МГц)

1. M. Josse, O. Bidault, F. Roulland, E. Castel, A. Simon, D. Michau, M. Maglione, Solid State Sciences, 11(6), 1118-1123 (2009).

Структурная обусловленность ионного транспорта $\text{La}_{1-y}\text{Sr}_y\text{F}_{3-y}$ ($0 \leq y \leq 0.15$) по данным дифракции нейтронов на монокристаллах

*А.И. Калюканов^{1,2}, Н.Б. Болотина², Л.Е. Фыкин¹, Н.Н. Исакова¹,
Н.И. Сорокин², Б.П. Соболев²*

¹ Филиал ОАО «НИФХИ им. Л.Я.Карпова», Обнинск, Россия

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

Кристаллы состава RF_3 и нестехиометрические фазы $\text{R}_{1-y}\text{M}_y\text{F}_{3-y}$ (R – редкоземельные элементы, M – щелочноземельные элементы) относятся к классу твердых электролитов по фтору и являются перспективными материалами для создания электрохимических источников тока нового поколения [1].

Величина проводимости зависит от качественного состава (R, M) и характеризуется сильной нелинейной зависимостью от количественного состава (y), достигая максимума вблизи $y = 0.05 - 0.07$ [2]. Структурные исследования RF_3 и нестехиометрических фаз $\text{R}_{1-y}\text{M}_y\text{F}_{3-y}$ проводились в разное время на нескольких кристаллах без систематизации по составу и не смогли выявить причины этих различий.

На сегодняшний день известны две формы RF_3 : разупорядоченная форма $\alpha\text{-RF}_3$ с пр. гр. $\text{R}\bar{6}_3/\text{mmc}$ и «малой» элементарной ячейкой ($Z = 2$) и упорядоченная $\beta\text{-RF}_3$ с пр. гр. $\text{P}\bar{3}c1$ и «большой» ячейкой ($Z = 6$). Структурные механизмы перехода из одной формы в другую требуют объяснения.

Для структурного исследования были отобраны монокристаллы составов $\text{La}_{1-y}\text{Sr}_y\text{F}_{3-y}$ ($y = 0, 0.05, 0.07$ и 0.15) “as grown”. Нейтронографическое исследование проводилось на четырехкружном монокристалльном дифрактометре [3], установленном на горизонтальном канале реактора ВВР-ц (филиал ОАО «НИФХИ им. Л.Я.Карпова»). Были обнаружены сверхструктурные по отношению к «малой» ячейке рефлексy для составов $y = 0, 0.05, 0.07$.

Установлена смена пространственной группы с переходом из «большой» ячейки в «малую» с ростом содержания SrF_2 . Обсуждается влияние микродвойникования и симметрии кристаллов определенного состава на проводимость. Предлагается механизм ионного транспорта.

1. M. Anji Reddy and M. Fichtner. J. Mater. Chem., 2011, 21, 17059-17062.
2. Н.И. Сорокин, Б.П. Соболев. // ФТТ. 2008. Т.50. вып. 3. С. 402-407.
3. Датт И.Т., Озеров Р.П., Раннев Н.В. // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. 1974. вып. 13, С. 16.

Исследование из первых принципов транспортных свойств топологического изолятора Bi_2Se_3 под давлением

Ю.В. Лысогорский, А.Г. Киямов, О.В. Недопекин, Д.А. Таюрский

Институт физики КФУ, Казань, Россия

Исследователей со всего мира привлекают уникальные свойства топологических изоляторов. Важнейшей проблемой при исследовании транспортных свойств топологических изоляторов является разделение объемной и поверхностной проводимостей. Один из способов разделения в эксперименте объемного и поверхностного вклада в проводимость основан на предположении о том, что давление способно подавлять объемную проводимость, не затрагивая при этом поверхностных топологических состояний. За последнее время было проведено огромное количество исследований транспортных свойств топологических изоляторов под давлением.

В работе [1] представлены подробные экспериментальные исследования различных свойств топологического изолятора Bi_2Se_3 под давлением. Из полученных авторами статьи [1] результатов видно, что с увеличением давления до 8 ГПа сопротивление образца плавно возрастает. Однако после прохождения отметки 8 ГПа сопротивление резко падает. Концентрация носителей также растет и после достижения давления 8 ГПа становится на порядок выше нормального значения. Описанное поведение транспортных свойств топологического изолятора может являться как следствием объемных электронных свойств Bi_2Se_3 , так и проявлением топологических поверхностных состояний. Хотя авторам не удалось объяснить природу полученных зависимостей, тем не менее, они считают, что исследование зависимости зонной структуры Bi_2Se_3 от давления может помочь в решении этого вопроса.

Таким образом, целью нашей работы являлось установить следствием объемных или поверхностных электронных свойств Bi_2Se_3 являлись значительный рост концентрации носителей заряда и необычное поведение сопротивления. В данной работе структурная оптимизация, расчеты структурных свойств и электронной структуры проводились в рамках теории функционала плотности.

Полученные нами результаты позволяют утверждать, что подход разделения давлением объемного и поверхностного вкладов в проводимость себя не оправдал. Полученные в ходе эксперимента зависимости сопротивления и концентрации носителей заряда от давления являются проявлением объемных электронных свойств Bi_2Se_3 .

1. J. J. Hamlin, J. R. Jeffries, et al// Journal of Physics: Condensed Matter 24, 3 (2012)

Механизмы получения постоянных магнитов

А.В. Ковалев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

При трактовке механизмов получения постоянных магнитов обычно учитываются химический состав сплава, особенности технологических процессов и результаты изучения макроструктуры готового изделия, т. е. эта область деятельности считается прикладной. С другой стороны, сам факт существования постоянных магнитов оказывается сложной физической проблемой, содержание которой коротко выглядит следующим образом [1,2].

Принципы П.Кюри используются и как основные постулаты кристаллофизики, при выполнении которых, в частности, нарушается симметрия любого магнитного кристалла по отношению к операции обращения времени, что в настоящее время не считается экзотикой. Но для объяснения устойчивости намагниченного состояния ферромагнетика приходится предположить, что при магнитных фазовых переходах происходит сильное нарушение принципа T -инвариантности.

Другими словами, должна существовать однозначная взаимосвязь пространственной ориентации кристаллитов магнитных фаз с направлением вектора спонтанной намагниченности, предсказать которую современная теория не позволяет. Поэтому для снятия проблемы постоянного магнита достаточно методами рассеяния нейтронов и синхротронного излучения установить такую взаимосвязь, что позволит использовать принципы симметрии для решения практических задач физики магнитных материалов.

При выполнении исследований в этом направлении необходимо учитывать конкретное содержание фундаментальных принципов симметрии и существенные условия опыта, которые могут приводить к нарушению этих принципов. Возможность однозначной трактовки экспериментальных данных предопределяется выбором образцов. В этом смысле удобными объектами оказались пленки Co–Fe сплава, на которых впервые удалось измерить моноклинные искажения типичного «кубического» ферромагнетика, соответствующие принципам Кюри. Предложена общая схема наведенной магнитной анизотропии и установлена причина роста остаточной намагниченности после нагрева пленок. При рассеянии нейтронов массивными образцами [3] принципиальных отличий результатов измерений не обнаружено.

1. А. В. Ковалев. Перспективные материалы 3, 5 (2004).
2. А. V. Kovalev. J. Mag. Mag. Mater. 300, e550 (2006).
3. А. В. Ковалев, О. П. Смирнов. ФТТ. 55, 81 (2013).

Стронциевый перовскит в качестве электрода для циркониевого электролита

Д.И. Лобанов, А.Л. Надольский

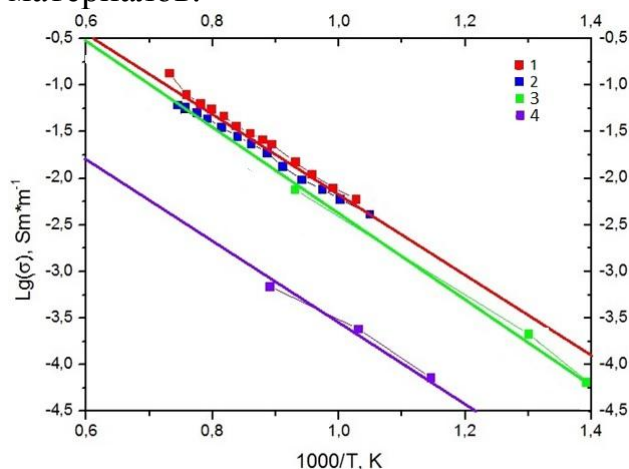
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Большинство электрохимических устройств изготавливают на основе допированной двуокиси циркония и губчатой платины в качестве электродов. Одними из основных недостатков таких электродов являются: 1) Площадь, на которой возможен процесс зарядки – разрядки кислорода ограничен тройной границей (узкая полоска) твердый электролит – платина (островки) – газовая атмосфера. 2) Из-за существенного различия коэффициента термического расширения (КТР) металла и керамики, при термоциклировании происходит отслаивание платины – прибор выходит из строя.

В этой работе проведены исследования возможности использования в качестве электродов стронциевых перовскитов допированных железом, которые обладают как ионной (по кислороду), так и электронной проводимостью. Спекание перовскита и твердого электролита проводили на воздухе при температуре 1650К, в течении 4 часов. Ионную проводимость измеряли при $P_{O_2} = 0.21$ атм. в диапазоне температур 900 - 1200К. К электродам прикладывали разность потенциалов - 2 В. Эталонном сравнения служил тв. электролит с платиновыми электродами.

Измерения показали, что электроды из перовскита увеличивают проводимость по кислороду в сравнении с платиновыми.

По мнению авторов, это связано с тем, что перовскит обеспечивает доставку кислорода и электронов к границе электрод – электролит по всей площади последнего. Термоциклирование не приводит к отслаиванию электрода. Причина, вероятно, в близости КТР обоих керамических материалов.



Индукцированная магнитным полем кристаллизация спиновой жидкости в твердых растворах замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$

*И.И. Лобанова¹, В.В. Глушков^{1,2}, В.Ю. Иванов², Н.Е. Случанко²,
С.В. Григорьев³, С.В. Демисhev^{1,2}*

¹ *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

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

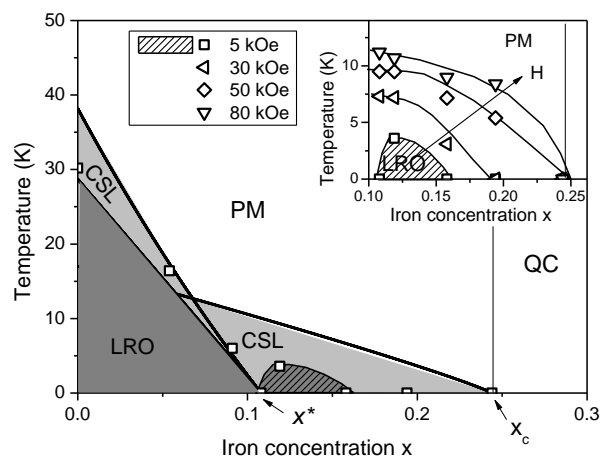
³ *Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

Система с сильными электронными корреляциями, $Mn_{1-x}Fe_xSi$, привлекает внимание благодаря своим необычным магнитным свойствам. Магнитная фазовая диаграмма $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в пределе слабого магнитного поля $B \rightarrow 0$ была исследована в [1]. Замещение марганца железом подавляет переход в основное ферромагнитное состояние и приводит к возникновению двух квантовых критических точек: $x^* \sim 0.11$, в которой исчезает фаза с дальним магнитным порядком (LRO), и $x_c \sim 0.24$, соответствующая подавлению фазы киральной спиновой жидкости (CSL). При $x > x_c$ образуется квантовая критическая фаза Гриффитса (QC) [1]. В настоящей работе изучалось влияние магнитного поля до 8 Тл на T - x магнитную фазовую диаграмму.

С этой целью были исследованы полевые и температурные зависимости магнитосопротивления, измеренного в диапазоне температур 2-60 К. Анализ экспериментальных данных позволил установить возникновение области существования LRO фазы, индуцированной магнитным полем (заштрихованная область на рисунке). Увеличение внешнего магнитного поля ведет к расширению как температурных, так и концентрационных границ существования LRO фазы (вставка на рисунке).

Появление LRO фазы, индуцированной магнитным полем, указывает на эффект «затвердевания» спиновой жидкости и появление новой области с дальним магнитным порядком.

Работа выполнена при поддержке проектом РФФИ 13-02-0016 и программой РАН «Сильно коррелированные электроны».



Структура и ионная проводимость твердых растворов в системе K_2CO_3 – $AgNO_3$ – Sb_2O_3 – MeO_3 ($Me = W, Mo$)

Ю.А. Лупицкая, Д.А. Калганов, В.А. Бурмистров

ФГБОУ ВПО «Челябинский государственный университет», Челябинск, Россия

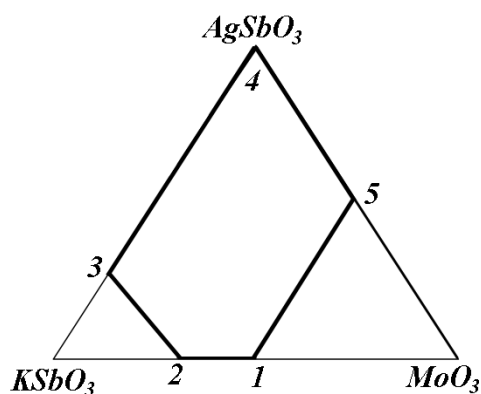


Рис. Область образования твердого раствора со структурой типа пирохлора на диаграмме составов $KСbO_3$ – $МоО_3$ – $AgSbO_3$ ($T=1123 K$): 1 – $KСbMoO_6$, 2 – $K_{1.5}Sb_{1.5}Mo_{0.5}O_6$, 3 – $K_{1.4}Ag_{0.6}Sb_2O_6$, 4 – $Ag_2Sb_2O_6$, 5 – $AgSbMoO_6$

Исследованы особенности образования твердых растворов в системе K_2CO_3 – $AgNO_3$ – Sb_2O_3 – MeO_3 ($Me = W, Mo$) при нагревании. Для температуры 1123 К в концентрационных треугольниках $KСbO_3$ – MeO_3 – $AgSbO_3$ определены однофазные области существования сложных оксидов сурьмы (V), содержащих ионы калия и серебра, изоморфных пирохлору. Впервые в рамках этой структуры получены фазы состава $Ag_{1.5}Sb_{1.5}W_{0.5}O_6$ и $AgSbMoO_6$, не содержащие ионов калия. В докладе обсуждается модель заполнения ионами кристаллографических позиций по правильной системе точек структуры типа пирохлора в полученных соединениях. Особый интерес представляют сложные

оксиды сурьмы с большой разупорядоченностью катионной подрешетки, устойчивые в широком температурном интервале, носителями заряда в которых являются ионы щелочных металлов. Такие материалы могут быть получены путем твердофазного синтеза в системе $(y-x)K_2CO_3$ – $xAgNO_3$ – ySb_2O_3 – $2(2-y)MeO_3$ ($0 \leq x \leq y$, $1.0 \leq y \leq 2.0$) при нагревании.

Однако до настоящего времени неизученными остаются вопросы образования и устойчивости фаз, полученных в данной системе, не определены концентрационные интервалы синтеза фаз, кристаллизующихся в рамках структуры типа пирохлора. В связи с этим целью работы явилось установление концентрационных интервалов образования сложных оксидов сурьмы (V), изоморфных пирохлору, в системе K_2CO_3 – $AgNO_3$ – Sb_2O_3 – MeO_3 ($Me = W, Mo$) при нагревании. Из рентгеновских данных следует, что при 1123 К однофазные области соединений, изоморфных пирохлору, ограничиваются пятиугольниками. Анализ дифракционных данных произведен методом Ритвельда с помощью программы GSAS. На рис. приведена область образования твердого раствора со структурой типа пирохлора для системы $KСbO_3$ – $МоО_3$ – $AgSbO_3$.

1. Ю. А. Лупицкая, В. А. Бурмистров. Ж. неорган. химии. Т. 56, № 2, С. 329–330 (2011).

Структура и особенности оптических фононов массива вертикальных микростержней оксида цинка

Н.В. Лянгузов, Е.М. Кайдашев, Ю.И. Юзюк

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Массив вертикальных микростержней оксида цинка синтезирован карботермическим методом [1] в конфигурации квазизамкнутого реакционного объема при температуре 930 °С на подложке монокристаллического кремния с тонкопленочным подслоем ZnO. Длина стержней составляет 9 ± 0.5 мкм, диаметр – 210 ± 50 нм. Рентгенографические исследования подтвердили взаимную кристаллографическую ориентацию $[001]_{\text{ZnO}} \parallel [001]_{\text{Si}}$ в направлении нормали к плоскости подложки. В плоскости сопряжения массив проявляет полную азимутальную разориентацию. Вычисленные параметры элементарной ячейки стержней в пределах точности измерения не отличаются от параметров ячейки монокристалла.

В поляризованных спектрах комбинационного рассеяния массивов стержней ZnO наблюдаются запрещенные правилами отбора [2] для монокристалла ZnO в геометрии $z(xx)\bar{z}$ моды наклонных фононов $Q(\text{TO})$ и $Q(\text{LO})$; в геометрии $x(yz)\bar{x}$ – моды $A_1(\text{TO})$ и E_2^{high} , в геометрии $x(zz)\bar{x}$ – мода $E_1(\text{LO})$. Мы объясняем этот факт рефракционными и дифракционными эффектами при взаимодействии возбуждающего излучения с массивом стержней. Обнаружено смещение спектрального положения наклонных фононов в зависимости от угла падения возбуждающего излучения β относительно кристаллографической оси c . Положения этих мод не соответствуют рассчитанным теоретически по соотношениям [3,4]:

$$\omega_{Q(\text{TO})}^2 = \omega_{A_1(\text{TO})}^2 \cos^2 \beta + \omega_{E_1(\text{TO})}^2 \sin^2 \beta; \quad \omega_{Q(\text{LO})}^2 = \omega_{E_1(\text{LO})}^2 \cos^2 \beta + \omega_{A_1(\text{LO})}^2 \sin^2 \beta \quad (1).$$

Спектральная ширина мод наклонных фононов составляет $\sim 30 \text{ см}^{-1}$, что вдвое превосходит соответствующее значения для объемного монокристалла. Проецирование величины дополнительного уширения этих мод на теоретические зависимости (1) дает интервал эффективных углов распространения излучения 35° при фиксированном угле падения.

Работа выполнялась при финансовой поддержке Министерства образования и науки, тема №2.5896 «Развитие методов получения и исследование свойств полупроводниковых наноструктур для создания элементов устройств нанофотоники».

1. B.D. Yao, Y.F. Chan, N. Wang. Appl. Phys. Lett. 81, 757 (2002).
2. J.M. Calleja, M. Cardona. Phys. Rev. B. 16, 3753 (1977).
3. R. Loudon. Adv. Phys. 13, 423 (1964).
4. E. Alarcon-Llado, R. Cusco, L. Artus, J. Jimenez, B. Wang, M. Callahan. J. Phys. Condens. Matter. 20, 445211 (2008).

Динамика доменных стенок в молекулярном магнетике [Mn^{II}(H(R/S)-pn)(H₂O)][Mn^{III}(CN)₆] 2H₂O

Ф.Б. Мушенок

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Синтез молекулярных магнетиков предоставляет широкие возможности для управления магнитными свойствами твёрдых тел путём блочного конструирования и контролируемого дизайна атомной и спиновой структур. Одним из актуальных направлений в этой области является создание хиральных молекулярных магнетиков. Методы химического дизайна позволяют создавать как хиральные, так рацемические формы одного и того же соединения. Это предоставляет уникальные возможности для обнаружения влияния хиральности на магнитные свойства.

В нашей работе была исследована динамика доменных стенок в хиральном и рацемическом порошкообразных образцах молекулярного магнетика [Mn^{II}(H(R/S)-pn)(H₂O)][Mn^{III}(CN)₆]2H₂O. Методом низкочастотной (АС) магнитной восприимчивости были разделены вклады различных режимов движения доменных стенок (переключение, скольжения, ползучести, Дебаевской релаксации) в процесс перемагничивания. В хиральной форме переходы от режима скольжения к режиму ползучести и Дебаевской релаксации происходят при T = 7 и 5 К, соответственно. В рацемической форме аналогичные переходы происходят при больших температурах T = 13 и 9 К, соответственно. Показано, что различие температур переходов обусловлено влиянием периодического потенциала кристаллической решетки (рельефа Пайерлса), который различается в хиральных и рацемических образцах.

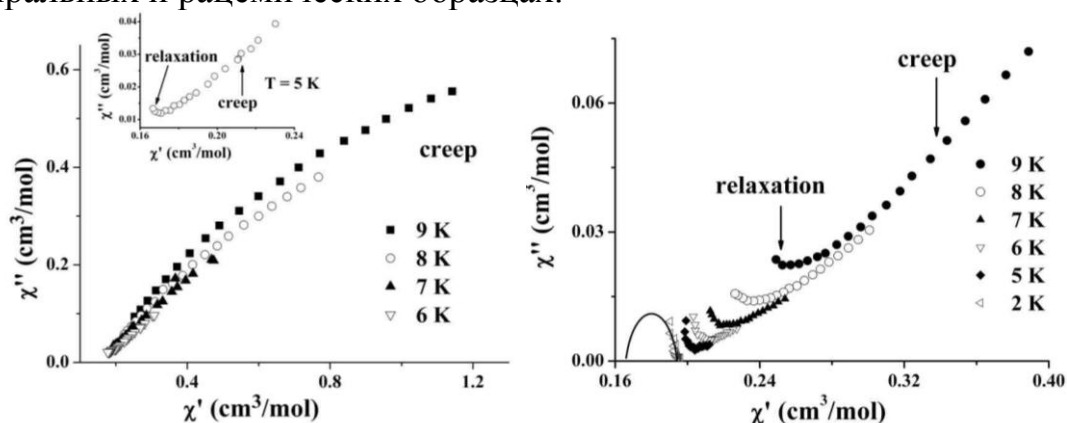


Рис. Диаграммы Коула-Коула $\chi''(\chi')$ в хиральном и рацемическом образцах [Mn^{II}(H(R/S)-pn)(H₂O)][Mn^{III}(CN)₆]2H₂O, T = 2 – 9 К.

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1474.2014.3.

Кристаллическая структура и магнитная микроструктура $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$

И.И. Нигъматуллина¹, В. В. Парфенов¹, А.В. Пятаев¹, Р.М. Еремина²

¹ Казанский федеральный университет, Казань, Россия

² Казанский физико-технический институт КНЦ РАН, Казань, Россия

Исследованы структурные и магнитные свойства YbMnO_3 , $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{MnO}_3$ и твердых растворов $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0.1; 0.2$) методами рентгеноструктурного анализа (РСА), магнитного резонанса (ЭПР), мессбауэровской спектроскопии (ЯГР).

Поликристаллические образцы стронций-замещенных ферроманганитов иттербия $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ ($x = 0; 0.1; 0.15; 0.2$) и манганита иттербия YbMnO_3 были синтезированы по керамической технологии из оксидов Yb_2O_3 , Mn_2O_3 , Fe_2O_3 и углекислого стронция SrCO_3 .

РСА ферроманганитов показал, что все образцы имеют структуру ильменита. Параметры решетки находятся в хорошем согласии с литературными данными [1].

В мессбауэровских спектрах ферроманганитов иттербия при комнатной температуре не наблюдается магнитной сверхтонкой структуры. Спектры хорошо описываются суперпозицией двух квадрупольных дублетов с расщеплениями, соответствующими искаженному октаэдрическому и гексаэдрическому окружению мессбауэровского катиона [2]. Магнитное фазовое расслоение в мессбауэровских спектрах наблюдается при температуре 80К, когда спектр представляет собой суперпозицию дублета и секстета.

Измерения спектров ЭПР $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ осуществлялись в X-диапазоне при температурах от 100 до 320К. При низких температурах спектры $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ состоят из двух линий с различным температурным поведением, т.е. наблюдается магнитно-двухфазное состояние. При повышении температуры вторая линия исчезает и выше этой температуры образцы $\text{Yb}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ парамагнитны.

1. S. L. Samal, T. Magdaleno, K. V. Ramanujachary, S. E. Lofland, A. K. Ganguli // Journal of Solid State Chemistry. - 2010. -V.183. - P.643-648.
2. X. Fabrèges, I. Mirebeau, P. Bonville, S. Petit, G. Lebras-Jasmin, A. Forget, G. Andre, S. Pailhes // Phys. Rev. B. -2008. - V.78. - P.214422(1)-214422(8).

Сегнетоэлектрический фазовый переход в лопарите-(Ce)

Е.А. Попова^{1,2,3}, В.Г. Залесский¹, S. Gvasaliya³, С.Г. Лушников¹, С.В. Кривовичев², А. Zheludev³

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

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

³ Neutron Scattering and Magnetism, Laboratory for Solid State Physics, Zurich, Switzerland

В данной работе представлены результаты исследования динамики решетки лопарита, природного комплексного перовскита сложного состава $(\text{Ce,Ca,Na,M})(\text{Ti,Nb})\text{O}_3$ (где $\text{M} = \text{Sr,TR,Th}$ и т.д.), методами рамановской и диэлектрической спектроскопии. В земной коре минералы группы перовскита являются акцессорными, тогда как соединения с перовскитовой структурой являются основной формой вещества в условиях нижней мантии. В связи с этим исследования динамики кристаллической решетки перовскитоподобных соединений необходимы для понимания механизмов структурных трансформаций минералов в глубине Земли.

Измерение действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости проводилось импедансметром Good Will LCR-819 в интервале частот 12 Hz – 100 kHz с амплитудой 1.5 V. Для исследования диэлектрических петель гистерезиса использовалась схема Сойлера-Гауэра в интервале температур 115-170 K, в поле от 0 до 6 kV/cm частотой 50 Hz. Эксперименты по рассеянию света проводились на тройном монохроматоре Trivista 557 с твердотельным лазером с длиной волны 532 нм в 180° -градусной геометрии. Оптическая схема была дополнена микроскопом, который позволял фокусировать луч в точку порядка 1 мкм.

Анализ данных диэлектрических измерений позволяет связать аномалию в окрестности 160K с переходом в сегнетоэлектрическую фазу. Действительно, в окрестности 160K зависимость $\epsilon'(T)$ следует закону Кюри-Вейсса с $C=2.2 \times 10^5 \text{ K}^{-1}$, $T_C=157\text{K}$, $\epsilon_{max}=56.7$, а ниже T_C наблюдались петли диэлектрического гистерезиса. Анализ поляризованного рамановского спектра показал существование аномального смягчения низкочастотной оптической моды в окрестности 150K. Опираясь на полученные в ходе диэлектрических и оптических измерений данные, можно заключить, что в монокристаллах лопарита в окрестности 150K реализуется сегнетоэлектрический фазовый переход I рода типа порядок-беспорядок, что является первым случаем обнаружения сегнетоэлектричества в природных перовскитах.

Кристаллизация пористых пленок анодного оксида алюминия

И.В. Росляков, Н.С. Куратова, К.С. Напольский, А.А. Елисеев

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

Пористые пленки анодного оксида алюминия (АОА) находят широкое применение в качестве мембран для проведения процессов газоразделения и жидкостной фильтрации, а также матриц для формирования наноструктур различного состава и геометрии. Для большинства из вышеупомянутых применений пористые пленки должны обладать долговременной химической устойчивостью и стабильностью при высоких температурах. По литературным данным этого можно добиться путем предварительного отжига АОА при температурах более 800°C [1, 2]. Однако термообработка приводит к механической деформации (изгибанию, скручиванию, растрескиванию) первоначально плоских образцов, что недопустимо для их практического применения.

Целью настоящей работы является исследование процессов кристаллизации, протекающих в пленках АОА при высоких температурах, а также подбор условий отжига не приводящих к их механической деформации.

По данным рентгенофазового анализа при отжиге изначально аморфных пористых пленок при 800°C в течение 3 часов происходит кристаллизация анодного оксида алюминия в смесь θ -, γ - и δ - фаз Al_2O_3 . Процесс сопровождается дегидратацией и удалением анионных примесей, внедренных в структуру АОА из электролита во время анодирования, что в свою очередь приводит к увеличению площади поверхности вследствие образования мезопор. При этом видимых изменений в пористой структуре на микромасштабе после отжига при 800°C не наблюдается – каналы сохраняют свою форму, размер и мотив упаковки.

В качестве основного метода борьбы с механическими деформациями АОА в процессе термообработки в настоящей работе предложена методика, заключающаяся в отжиге пористых пленок под действием механической нагрузки. Экспериментально показано, что приложение давления $\sim 0,1$ Н/см² позволяет получить ровные пористые пленки АОА толщиной 30-50 мкм в кристаллическом состоянии. Для более тонких и толстых мембран требуется дальнейшая оптимизация параметров термообработки.

1. L. Fernandes-Romero, et al., Mat. Chem. Phys. 111, 542 (2008).
2. I.V. Roslyakov, K.S. Napolskii, et al., Nanosist.: fiz. him. mat. 4, 120 (2013).

Исследование кристаллической и магнитной в сложном оксиде кобальта $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_{2.8}$ при высоких давлениях

*А.В. Руткаускас¹, Д.П. Козленко¹, С.Е. Кичанов¹, Н.Т. Данг²,
Е.В. Лукин¹, Б.Н. Савенко¹*

¹*Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

²*Center of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam*

Сложные оксиды кобальта проявляют множество различных физических свойств: гигантское магнитосопротивление, переходы диэлектрик – металл, орбитальное и зарядовое упорядочение и т.д. Изучение и объяснение, которых является одним из приоритетных направлений физики конденсированных сред.

Нейтроннографические структурные исследования при высоких давлениях дают уникальную возможность выявить структурные механизмы формирования магнитного состояния в сложных оксидах кобальтита, разделить вклады от конкурирующих магнитных взаимодействий за счет их разной зависимости от структурных параметров, установить наличие спиновых переходов ионов Co^{3+} и их роли в формировании магнитных свойств.

В данной работе проведены исследования сложного оксида кобальта $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_{2.8}$ методами нейтронной и рентгеновской дифракции в диапазонах давлений до 5 ГПа и 30 ГПа соответственно, а также в температурном интервале от 10 К до 300 К. Было установлено, что при нормальном давлении и низких температурах данное соединение имеет кубическую структуру с пространственной группой $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ и является антиферромагнетиком с G-типом упорядочения до 215 К. При давлении 2.8 ГПа происходит переход из кубической $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ в тетрагональную структуру с пространственной P/mmm . Данный переход сопровождается изменением магнитной структуры данного кобальтита из антеферромагнитной в ферромагнитное состояние.

Рентгено- и нейтронографические исследования формирования и устойчивости фаз со структурой типа $E9_3$ в сплавах системы Ni–Nb

В.В. Савин¹, В.А. Семин²

¹ *Институт физики и химии ТГУ, Тюмень, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

В работе [1] обобщены факторы, влияющих на формирование и устойчивость фаз со структурой типа $E9_3$ в сплавах систем ПМ(VIII)-ПМ(IV÷VI) или РЗМ при неравновесной кристаллизации в условиях закалки из жидкого состояния (ЗЖС) и при отжиге аморфных сплавов (АС). В системе Ni–Nb выявлено существование двух фаз указанного типа с разными периодами решетки: η' ($1,120 \pm 0,001$ нм) и η'' ($1,164 \pm 0,002$ нм). В системах исследованных ПМ атомы внедрения (Н, N, С, О) способствуют образованию тройных фаз типа $E9_3$, родственных фазе $Ti_2Ni: Fe_3W_3C$ или Fe_6W_6C . Стабилизирующая роль кислорода на их формирование проявляется при его концентрации больше 5 ат. % [2].

В связи с этим в настоящей работе были выполнены системные исследования влияния примесей внедрения на формирование и устойчивость структуры фаз типа $E9_3$ при кристаллизации в условиях ЗЖС и отжиге АС $Ni_{(60 \pm 30)}Nb_{(40 \pm 70)}$.

Суммарное содержание примесей внедрения в исследованных сплавах не превышало 2 ат. %. Сочетание рентгено- и нейтронографического анализов для изучения структуры фаз η' и η'' позволило уточнить переменные параметры базиса их кристаллической решетки и доказать наличие в нем атомов внедрения в позициях $8(a)$.

Используя кристаллохимический подход, анализируя особенности структурно-фазовых превращений в сплаве при кристаллизации сильно переохлажденного расплава и отогреве АС было дано объяснение экспериментальному факту формирования двух фаз типа $E9_3$:

- это – фазы двух разных структурных типов: Fe_6W_6C и Ti_2Ni ;
- формирование обеих фаз связано с соответствующими факторами: электронной концентрации и размерным;
- для η' -фазы $Ni_6(Nb_{1-x}Ni_x)_6(C,O,N,H)$ соответствующий фактор электронной концентрации реализуется за счет наличия в сплаве примесных атомов;
- образование η'' фазы состава $Ni(Nb_{1-x}Ni_x)_5$, где x – малая величина, обусловлено наличием в базисе структуры типа $E9_3$ благоприятной стехиометрии $1/5 = \{16(d)/[32(e)+48(f)]\}$, в рамках которой в системе Ni–Nb реализуется электронная концентрация, характерная для фазы Ti_2Ni .

1. В. В. Савин, Е. Ю. Костенко. Кристаллохимия промежуточных фаз и аморфных сплавов на основе переходных металлов. Монография.- Запорожье: ЗНУ, 2005.
2. M. V. Nevit, Trans. of the Metals Soc. Of AIME, V.218 (1960).

Исследование кристаллической и магнитной структур твердых растворов бариевых ферритов, частично замещенных ионами алюминия

В.А. Турченко^{1,2}, А.В. Труханов³, И.А. Бобриков¹, С.В. Труханов³

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

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

Интерес к бариевым ферритам ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) и твердым растворам на их основе, допированным различными ионами (Al, Sc, Ga и др.) связан с их уникальными физическими свойствами: сильной анизотропией кристаллических и магнитных свойств и высоким значением температуры Кюри. Кроме того, значительная сегнетоэлектрическая поляризация была обнаружена в керамике $\text{PbFe}_{12}\text{O}_{19}$ [1] и $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ [2] с гексагональной структурой, при наличии ферромагнитного упорядочения.

Цель данной работы – установление закономерностей влияния частичного замещения ионов железа диамагнитными ионами алюминия на изменение кристаллической и магнитной структур твердых растворов $\text{BaFe}_{12-x}\text{Al}_x\text{O}_{19}$ ($x=0-0.9$) в широком интервале температур. Уточнение кристаллической и магнитной структур

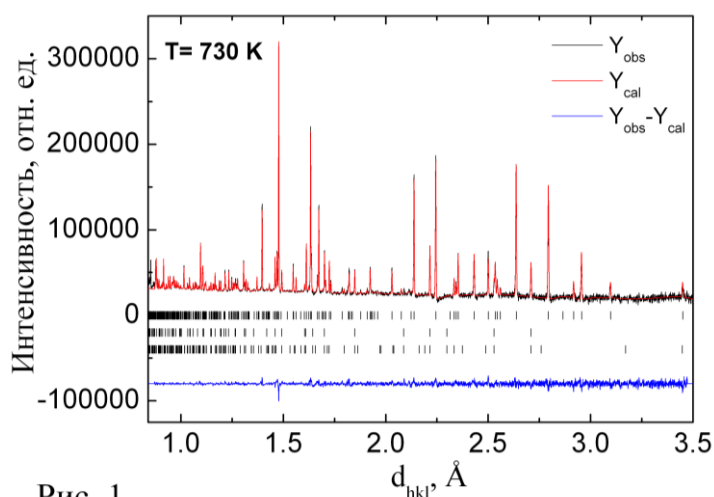


Рис. 1.

проводили на нейтронном фурье дифрактометре высокого разрешения на импульсном ядерном реакторе (ИБР-2М, г.Дубна) в интервале температур от 4.2 до 730 К. Согласно данным рентгеновской и нейтронной дифракции, рассчитанных методом Ритвельда в программе FullProf бариевый феррит обладает гексагональной структурой ($P6_3/mmc$) (Рис.1). Магнитная структура $\text{BaFe}_{12-x}\text{Al}_x\text{O}_{19}$ ($x=0-0.9$) в исследуемом интервале температур хорошо описывается моделью, предложенной Гортером [3].

1. Tan, G. L.; Wang, M.; J. Electroceramics, **26**, 170 (2011).
2. Xiuna Chen, Guolong Tan, J. Magn. Magn. Mater. **327**, 87 (2013).
3. E.W. Gorter, Proc. IEEE Suppl., V. **104** B, 225 (1957).

Секция «Биология и физика»

Особенности мандельштам-бриллюэновского рассеяния света в растворах белков в окрестности температуры денатурации

*В.Э. Вашченко^{1,2}, А.В. Дмитриев^{1,2}, А.И. Федосеев², В.П. Романов¹,
С.Г. Лушников^{1,2}*

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

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

Динамика и структура биополимеров тесно связаны с вопросами их активности и механизмами функционирования. Хорошо известны такие фазовые превращения белков как денатурация, при которой макромолекула теряет свои нативные свойства. Известно, что динамика биополимеров в диапазоне частот от 1 до 1000 ГГц обычно отражает локальные конформационные изменения, т.е. прыжки атомов от одной конфигурации к другой, и коллективные возбуждения. Наиболее адекватным методом исследования (разрешение, поляризационные свойства и т.д.) низкочастотного диапазона колебательного спектра является мандельштам-бриллюэновско рассеяния (МБР) света. Первые эксперименты по исследованию колебательного спектра лизоцима показали аномальное поведение в низкочастотной динамике белка при денатурации [1]. В настоящей работе с помощью МБР света изучалась низкочастотная динамика белков в окрестности температур денатурации. Объектами исследования были выбраны модельные белки: бычий сывороточный альбумин (БСА) и лизоцим.

В ходе проведенных измерений было показано, что интенсивность и частота компонент МБР света, которые определяют поведение гиперзвуковых возбуждений, испытывают аномалии в окрестности температур денатурации и дальнейшего перехода белка в гелеподобное состояние. Наиболее интересным фактом, проявившимся в экспериментах, является существование VH компоненты (запрещенной правилами отбора), исчезающей при денатурации белка. Полученные результаты обсуждаются в рамках современных представлений как физики конденсированных сред.

1. А. В. Сванидзе, В. П. Романов, С. Г. Лушников, Письма в ЖЭТФ **93** 7 (2011) 453

Структурные превращения в глюконатах металлов при механоактивации

*Е.В. Воронина¹, Д.С. Рыбин³, Г.Н. Коныгин³, Т. Миянага²,
Е.П.Елсуков³, И.П. Арсентьева⁴*

¹ Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

² Университет Хиросаки, Хиросаки, Япония

³ Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

⁴ Московский государственный открытый университет им.В.С.Черномырдина, Москва, Россия

В докладе представлены результаты экспериментальных исследований локальной атомной, молекулярной, электронной структуры и физико-химических свойств механоактивированных молекулярных кристаллов глюконатов металлов (глюконатов калия, натрия, кальция) в твердом состоянии и растворах. Актуальность проведения исследований обусловлена необходимостью понимания механизмов формирования уникальной биологической активности нанодисперсного рентгеноаморфного механоактивированного моногидрата глюконата кальция.

Анализ EXAFS-спектров (*K*-край Са, Photon Factory КЕК, Цукуба, Япония) образцов кальция глюконата, выдержанных в растворе, говорит о возможном переходе метастабильных молекулярных состояний, возникающих в результате деформационно-индуцированных структурных превращений, в более стабильную форму при длительной выдержке в растворе и последующем высаливании, что согласуется с полученными ранее [1] данными ИК- и ЯМР- спектроскопии. Методом электронной микроскопии высокого разрешения установлено образование двумерных структур при механоактивации глюконата кальция. Морфологические исследования показали, что структурные единицы представляют собой пластинчатые образования толщиной, не превышающей 5 нм, шириной 20-200 нм и длиной до 10 мкм.

Анализ результатов EXAFS-, ИК-, ЯМР-спектроскопии в совокупности с данными просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения привел к выводу о реорганизации пространственной структуры молекул глюконатов, индуцированной интенсивными механическими воздействиями. Предполагается, что биологическая активность и физико-химические свойства механоактивированных органических и бионеорганических молекулярных кристаллов определяются не только их морфологическими изменениями, но и трансформацией пространственного и электронного строения самой молекулы глюконата кальция при механоактивации.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 12-02-01316-а и гранта КЕК 2010G575.

1. Рыбин Д.С., Коныгин Г.Н. и др. Химическая физика и мезоскопия, т.15, 3 (2013) 429.

Низкочастотная динамика молекулы ДНК при конформационных изменениях

А.В. Дмитриев^{1,2}, *А.И. Федосеев*², *Г. Захаров*^{2,3}, *А. Журавлев*³,
А.В. Медведева^{2,3}, *Б.Ф. Щеголев*³, *Е.В. Савватеева-Попова*^{2,3}, *С.Г. Лушников*^{1,2}

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

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

³ Институт физиологии им. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия

В работе рассматриваются результаты экспериментов по мандельштам-бриллюэновскому рассеянию света в растворе ДНК в температурном интервале 297 – 375 К. В качестве экспериментального образца ДНК использовали фрагмент гена *limk1 D. melanogaster* (мутантная линия *agn^{ts3}*), включающий 119 пар первого интрона *limk1* с АТ-обогащенной вставкой длиной 28 пар. Для сравнения конформационной динамики исследовали фрагмент ДНК гена *limk1 D. melanogaster* линии дикого типа. В ходе экспериментов показано, что в температурных зависимостях поведения скорости гиперзвука ДНК *agn^{ts3}* наблюдали аномалии в окрестности 347 и 335 К, существенно модифицированные в температурных зависимостях ДНК дикого типа. Проведенные расчеты возможных конформационных состояний показали существование локальных структур, эволюционирующих при изменении температуры. Совместный анализ данных эксперимента и расчетов позволяет нам связать аномальное поведение спектров бриллюэновского рассеяния света с конформационной динамикой ДНК. Полученные результаты обсуждаются в рамках современных моделей конформационных превращений ДНК.

Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для исследования фотодеструкции биомембран

Л.В. Ельникова

ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия

Источники медленных моноэнергетических позитронов, базирующиеся на синхротронных установках (например, SPring-8 на кольцевом ускорителе в Рикене) и исследовательских реакторах (например, IRI в Делфе, FRM II в Мюнхене, ILL в Гренобле) [1,2] могут испускать частицы с энергиями до 30 кэВ. Они применяются для изучения дефектной структуры слоев вещества микро- и субмикрометровых размеров (это приповерхностные слои в электронных устройствах, клеточные стенки и жидкокристаллические агрегаты в биомедицинских приложениях и пр.) [3, 4]. Методы позитронной аннигиляционной спектроскопии (ПАС) обладают высокой чувствительностью к распознаванию дефектов и внутренней структуры вещества, в твердых телах она измеряется в ppm, а в полимерах достигает порядка 0,1-2 нм [3,5].

Настоящий доклад посвящен терапевтическим приложениям методов ПАС с пучками позитронов низких энергий. Различают временной метод регистрации аннигиляционных фотонов (ВРАФ), угловой (УРАФ) и доплеровского уширения спектральной линии. Диффузная длина позитрония и позитрона в клетках кожи, содержащей ткани, клетки, мембраны, неорганические ионы различна и определяется типом аннигиляции позитронов. В методе ВРАФ регистрируются различия времени жизни компонент атома позитрония Ps (связанного состояния e^-e^+), которые зависят от физико-химических свойств и структуры данного биологического объекта.

Рассматриваются эксперименты ПАС на коже мышей, подвергнутой УФ облучению [5], на раковых клетках кожи [6] при глубине проникновения медленных позитронов до 2 и 8 мкм соответственно. Об исследовании методом ВРАФ верхней роговой кожи свиней на предмет образования в клеточных структурах пор диаметром 0,5–0,8 нм сообщается в [7]. Перспективы ПАС в задачах фотодинамической терапии обсуждаются в [8].

1. В. Н. Беляев, Л. Ю. Дубов, и др., Инженерная физика № 1, 9 (2008).
2. И. Н. Мешков, В. Н. Павлов, и др. Приборы и техника эксперимента № 5, 68 (2007).
3. В. И. Графутин, Е. П. Прокопьев, Успехи физических наук 172, 67 (2002).
4. R. H. Stinson, D. King, et al., Phys. Letters 75 A, 246 (1980).
5. Y. C. Jean, H. Chen, et al., Rad. Phys. Chem. 76, 70 (2007).
6. Y. C. Jean, Y. Li, Applied Surface Science 252, 3166 (2006).
7. Y. Itoh, A. Shimazu, et al., Int. J. of Pharmaceutics 358, 91 (2008).
8. Л. В. Ельникова, Жидкие кристаллы и их практическое использование, 2(32) 75 (2010).

Структуры вирусных капсидов со сферической топологией в рамках тайлингового подхода

О.В. Коневцова¹, С.Б. Рошаль¹, V.L. Lorman²

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

²*CNRS – Université Montpellier, Montpellier, France*

Устройство всех известных капсидов подчиняется принципу квазиэквивалентности Каспара и Клуга (КК), согласно которому протеины должны располагаться в позициях максимально эквивалентных друг другу [1]. Квазиэквивалентность протеинов упрощает их внутреннюю структуру, что в свою очередь позволяет упростить и сделать более компактным вирусный геном. Геометрическая модель КК гарантирует квазиэквивалентность протеинов в капсиде, и как следствие, минимизирует количество конформаций, необходимых белковой молекуле для образования связей с соседями. В то же время, как нами было показано, добиться квазиэквивалентности протеинов можно на основе и совершенно других геометрических принципов, а именно на основе тайлингового подхода. В простейшем варианте такого подхода можно предположить, что белковые молекулы находятся в вершинах тайлов с одинаковыми ребрами. Тогда очевидно, что разбиение сферы тайлами, такое, что число их разных типов оказывается минимальным, также минимизирует количество конформаций, необходимых одинаковым белковым молекулам для образования связей с соседями. Подобная организация капсида может оказаться единственно возможной в том случае, когда количество протеинов в капсиде делает его несовместимым с геометрической моделью Каспара и Клуга [2]. Конкретно тайлинговая (квазикристаллическая) структура была обнаружена в хорошо известных капсидах сателлитного вируса табачной мозаики, L-A вируса, вируса лихорадки, вируса хлорозомы вигны, вируса Синдбис, сдвоенной частицы вируса кукурузного стрика и капсидов вирусов семейства Паповавирусов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13–02–12985)

1. D.L.D. Caspar and A. Klug, Physical Principles in the Construction of Regular Viruses // Cold Spring Harbor Symp. Quant. Bio. 27, 1 (1962).
2. O.V. Konevtsova, S.B. Rochal and V.L. Lorman, Chiral quasicrystalline order and dodecahedral geometry in exceptional families of viruses // Phys. Rev. Lett. 108, 038102 (2012).

Диагностика магнитных наночастиц в живом организме на основании мёссбауровских и магнитных данных

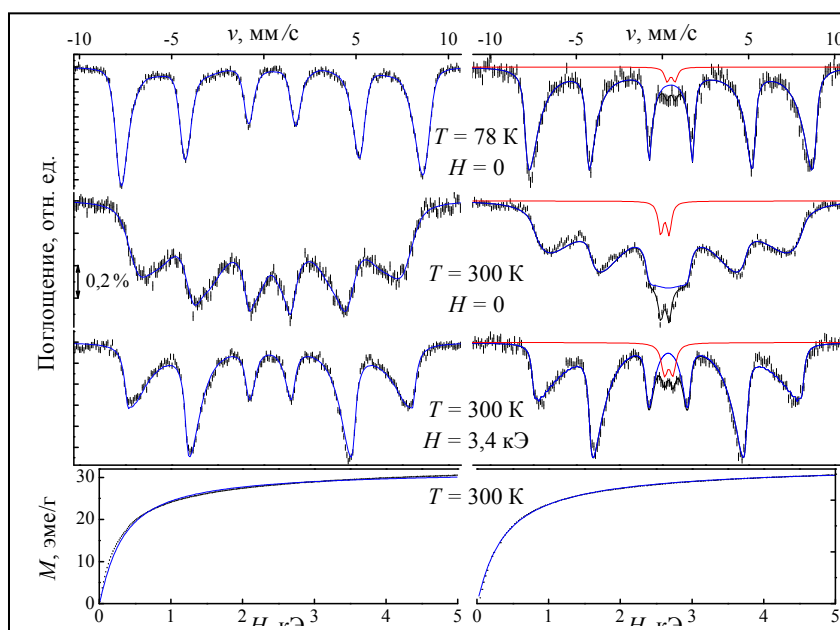
И.Н. Мищенко¹, М.А. Чуев¹, В.М. Черепанов², М.А. Поликарпов²

¹ Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Настоящая работа представляет метод диагностики железосодержащих наночастиц в живом организме на основе гамма-резонансной спектроскопии [1,2]. На примере введения магнитных частиц в организм мышей показано, что даже минимальный набор экспериментальных данных, включающий три мессбауровских спектра поглощения, снятых при разных температурах и во внешнем магнитном поле, совместно с кривой намагничивания, позволяет надежно определять ключевые характеристики 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 ансамбля наночастиц [3] разной магнитной природы [4], в том числе во внешнем поле [5] и с учётом сверхтонкого квадрупольного взаимодействия [6].

Рис. 1. Мёссбауровские спектры ядер ^{57}Fe и кривые намагничивания (вертикальные штрихи) исходных наночастиц (слева) и мышечной печени через два дня после их введения (справа). Сплошными линиями показаны результаты совместной обработки данных: парциальные спектры наночастиц (голубым), вклад ферритино-подобного белка (красным), результирующие спектры (чёрным цветом) и кривые намагничивания.



1. М.А. Чуев, et al., AIP Conf. Proc. 1311 (2010).
2. I. Mischenko, M. Chuev, J. Phys.: Conf. Ser. 345 (2012).
3. М.А. Чуев, J. Hesse, in 'Magnetic Properties of Solids' (Ed. K.B. Tamayo), Nova Science Publ., New York (2009).
4. М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ. 95, 6 (2012).
5. М.А. Чуев, ЖЭТФ. 141, 4 (2012).
6. М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ. 94, 4 (2011).

Исследование упорядоченной и неупорядоченной воды в тетрагональных кристаллах лизоцима с помощью ^2H ЯМР спектроскопии

*Ю.В. Пивоварова^{1, 2}, J. Milavec³, A. Rešetič³, B. Zupančič³, B. Zalar³,
С.В. Кривовичев², С.Г. Лушников^{1, 2}*

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

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

³ Institut "Jožef Stefan", Ljubljana, Slovenija

Интерес к исследованию воды в белковых кристаллах главным образом обусловлен проблемой понимания взаимодействия в системе белок-вода, имеющего первостепенное значение как для обеспечения биологической активности белковых молекул¹, так и для стабильности самих белковых кристаллов². Наиболее информативными методами для решения этой задачи являются белковая кристаллография и ЯМР спектроскопия, как жидкостная, так и твердотельная.

Кристаллы лизоцима различных модификаций ранее были изучены методом ^2H ЯМР спектроскопии^{3, 4}. В частности, в кристаллах ромбической сингонии было выявлено наличие закономерной ориентации для некоторых молекул воды, однако связь их ориентации с симметрией кристалла в целом не была прослежена⁵. В данном исследовании проводились ^2H ЯМР измерения дейтерированных кристаллов лизоцима тетрагональной сингонии (пр. гр. $P4_32_12$) на спектрометре Bruker Avance III 500 МГц при комнатной температуре. Полученные результаты позволяют оценить характер ориентации упорядоченных молекул воды в кристалле лизоцима тетрагональной модификации, а также возможное влияние симметрии белкового кристалла на закономерную ориентацию молекул воды.

1. Rupley J. A., Careri, G. Protein hydration and function // Adv. Protein Chem. 1991. V. 41, P. 37-172.
2. Frey M. Water structure associated with proteins and its role in crystallization. // Acta Crystallogr. 1994. D. 50. P. 663– 666.
3. Lauterbur P. C., Kaufman B. V., Crawford M. K. NMR studies of the protein-solvent interface. In Cellular Function and Molecular Structure.// B. D. Sykes, P. Agris, and R. H. Leppky, editors. Academic Press, New York. 1978. P. 329–351.
4. Borah B., Bryant R.G. Deuterium NMR of water in immobilized protein systems. // Biophys. J. 1982. V. 38. P. 47-52.
5. Venu K., L. Svensson A., Halle B. Orientational order and dynamics of hydration water in a single crystal of bovine pancreatic trypsin inhibitor. // Biophys. J. 1999. V. 77. P. 1074-1085.

Корреляция структуры и токсичности водных растворов фуллерена C₆₀

*А.А. Томчук¹, Е.А. Кизима^{1,2}, М.В. Авдеев¹, Л.А. Булавин²,
В.И. Петренко^{1,2}, Л. Алмаши³, М.В. Коробов⁴, И.В. Кошлань¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Исследовательский институт физики твердого тела и оптики, Будапешт, Венгрия

⁴ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов проведено сравнительное структурное описание водных растворов C₆₀/H₂O(NMP) и ВДФ–60, полученных различными методами. Результаты экспериментов по токсичности указанных систем на клетках V79 китайского хомяка показали отсутствие токсичных эффектов растворов, что определяет их перспективность использования в медико-биологических целях. Поскольку N-метилпирролидон не проявил высокую токсичность, это позволяет рассматривать его в качестве базового растворителя при дальнейших попытках получения водных мономерных растворов C₆₀ при условии дополнительной очистки образцов.

1. О. А. Кызума., М. V. Korobov, М. V. Avdeev, *et al.*, Chem. Phys. Lett. 103, 493 (2010).
2. А. А. Казначеевская (Томчук), Е. А. Кизима, Л. А. Булавин, и др., Поверхность. 21, 12 (2013).

Секция «Теория, модели и расчеты»

Indirect electronic transitions in quantum wells due to scattering of charge carriers by edge dislocations

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

Institute of Physics ANAS, Baku, Azerbaijan

In this paper we report the interband optical absorption in semiconducting quantum well (QW) system. A calculation has been made of the light absorption coefficient caused by indirect electronic transitions in the semiconductor QW, the role of the third body being played by an edge dislocation. Characteristic for the mechanism considered dependences of absorption coefficient on frequency.

We consider a two dimensional electron gas (2DEG) in a square QW system with the electrons assumed to be confined to move in the x - y plane. Assuming the usual effective-mass approximation for the conduction band, the electron wave functions and energy eigenvalues are given by [1]

$$\psi_{nk}(r, z) = \sqrt{\frac{2}{V}} \exp(ikr) \sin\left(\frac{n\pi z}{d}\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

And

$$E_{nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + n^2 E_0 \quad (2)$$

Where $r = (x, y)$ is position vector, $k = (k_x, k_y)$ is electron wave vector, d is width of the QW, n is the subband index and $E_0 = (\pi^2 \hbar^2 / 2m^* d^2)$.

The effect of strain field around dislocation is to shift the conduction and valence band edges. The perturbing potential for electron scattering can be expressed as [2]

$$V_{DS} = \left(\frac{a_c b}{2\pi r}\right) \left(\frac{1-2\gamma}{1-\gamma}\right) \sin \theta \quad (3)$$

where θ is the polar angle with respect to Burgers vector, b along QW plane, q is in plane wave vector, a_c , the conduction band offset and γ the Poisson ratio.

To calculate the probability of these edge dislocation –assisted optical transitions we need to use second –order perturbation theory

$$W = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{n'k'} \left| \sum_{n''k''} \left[\frac{(n'k'|H_{rad}|n''k'')(n''k''|V_{DS}|nk)}{E_{n'k'} - E_{n''k''} - \hbar\Omega} + \frac{(n'k'|V_{DS}|n''k'')(n''k''|H_{rad}|nk)}{E_{n''k''} - E_{nk} - \hbar\Omega} \right] \right|^2 \quad (4)$$

In Eq.(4) the interaction Hamiltonian between the electron and the radiation field H_{rad} given by

$$H_{rad} = (-e/mc)Ap$$

1. G.B. Ibragimov J.Phys.:Condens.Matter 14,(2002) 4977
2. R.P. Joshi, V. S.Shridhura et. al. J.Appl. Phys. 93 (2003) 10046.

Ренормировка спектра спиновых волн в трехмерном антиферромагнетике с дипольным взаимодействием

Л.А. Баталов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Тема моего исследования - спиновые волны в трёхмерных антиферромагнетиках с кубическими решётками. Микроскопический гамильтониан состоит из обменного (короткодействующего) и дипольного (дальнодействующего) взаимодействий. Основная величина, которая подлежит вычислению - спектр элементарных возбуждений - магнонов. Его вещественная часть даёт энергию магнона, а мнимая - обратное время жизни. Интерес к теме продиктован тем, что в последнее время в магнитоупорядоченных кристаллах стали выявлять довольно необычные свойства.

Теоретические работы говорят о том, что включение в гамильтониан дальнодействующих дипольных сил, несмотря на их малость, может существенно изменить структуру спектра. В последние годы появилась экспериментальная возможность проверки указанных выше особенностей: методами нейтронной спектроскопии в 2011 году было измерено время жизни магнонов с чрезвычайно короткими импульсами в кристалле-антиферромагнетике MnF_2 [1]. Дальнейшие эксперименты могут подтвердить тезис о существовании области волновых векторов, где магноны имеют аномально большое затухание.

1. S. P. Bayrakci *et al.*, Science, vol. 312, p. 1926 (2006)

**Квантовохимическое моделирование допированных нанотрубок
из диоксида титана и титаната стронция,
используемых для фотокаталитического расщепления воды**

*Д. Бочаров^{1,2}, С. Пискунов¹, О. Лисовский¹, Ю. Кайзеровский¹,
Е. Беген¹, Ю. Жуковский¹, Э. Шпор³*

¹ *Институт физики твёрдого тела Латвийского университета, Рига, Латвия*

² *Институт транспорта и связи, Рига, Латвия*

³ *Университет Дуйсбурга-Эссена, Duisburg, Germany*

Диоксид титана и титанат стронция являются перспективными материалами для водородной энергетики, благодаря таким их свойствам, как коррозионная устойчивость и ширина запрещённой зоны (~3 eV), которая делает материалы пригодными для фотокаталитического расщепления воды под воздействием солнечного света [1, 2]. Использование нанотрубок, в свою очередь, позволяет увеличить площадь поверхности материала, тем самым улучшив его фотокаталитические свойства [2].

Тем не менее беспримесные нанотрубки восприимчивы лишь к ультрафиолетовому излучению, на которое в солнечном спектре приходится менее 5% излучаемой энергии [3]. Чтобы повысить эффективность фотокатализа данные материалы допируют различными атомами или группами атомов, с помощью которых индуцируются дополнительные примесные уровни в запрещённой зоне, благодаря чему фотокатализ может происходить не только под воздействием ультрафиолетового излучения, но и под воздействием излучения видимого диапазона [2, 3].

В данной работе с помощью моделирования методом Линейной Комбинации Атомных Орбиталей в рамках программы CRYSTAL было оценено изменение структуры запрещённой зоны и плотности электронных состояний вследствие замещения в нанотрубках атомов О атомами С, N, S, и атомов Ti атомами Fe, соответственно [4].

Работа частично поддержана Латвийской Национальной Программой исследований LATENERGI.

1. S. Hara, M. Yoshimizu, S. Tanigawa, L. Ni, B. Ohtani, and H. Irie., P. B. Petrov, .I. I. Ivanov, et al., J. Phys. Chem. C 116, 17458 (2012).
2. Y.-C. Nah, I. Paramasivam, and P. Schmuki, ChemPhysChem, 11, 2698 (2010).
3. M. Niu, D. Cheng, D. Cao, Int. J. Hydr. En, 38, 1251 (2013).
4. Y.F. Zhukovskii, S. Piskunov, J. Begens, J. Kazerovskis, and O. Lisovski, Phys. Status Solidi B 250, 793 (2013).

**Исследование механизма взаимодействия бактерии
Bacillus subtilis с поверхностью кремния
посредством квантово-механических методов моделирования**

В.А. Бурко¹, Я.В. Долгая²

¹ БГУИР, Минск, Беларусь

² Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

Существенной проблемой эксплуатации биологических препаратов является необходимость соблюдения строгих условий хранения. Для решения этой проблемы предложено использовать пористые материалы в качестве «контейнера» для осаждения и хранения бактерий, такие как пористый кремний. Преимущества пористых материалов заключаются в том, что условия в поре можно считать постоянными, и бактерии, находящиеся в такой поре изолированы от воздействий окружающей среды, что позволяет продлевать сроки хранения бактерий и замедлить ее ферментативный процесс.

Для теоретического исследования механизма взаимодействия бактерии *B. subtilis* рассматривается строение клеточной стенки грамположительных бактерий, состоящей главным образом из цепочек пептидогликана. Анализируя ориентацию биомолекулы относительно подложки были определены активные фрагменты. Особое внимание привлекло наличие среди таковых кислорода, имеющего двойную связь с углеродом, поскольку π -связь слабее σ -связи она может принимать участие во взаимодействии с подложкой.

Рассмотрены два механизма образования новой связи кислорода с подложкой: взаимодействия кислорода непосредственно с кремнием; взаимодействие кислорода с водородом, связанным с атомом кремния. Результаты вычислений, проведенных методом SCF [1], показали, что при взаимодействии фрагмента клеточной стенки с поверхностью кремния по механизму C-O-Si, как и предсказывалось, может образовываться ковалентная связь Si-O, длиной ~ 0.17 нм. Взаимодействие по механизму C-O-H-Si не приводит ни к образованию ковалентной связи, ни к образованию водородной связи. Из полученных результатов можно сделать вывод, что бактерия будет иммобилизоваться посредством образования химических связей на кремниевой подложке, поверхность которой очищена от водорода.

1. M. Valiev et al., Comput. Phys. Commun. 181, 1477 (2010).

Фотогальванический эффект в открытом квантовом кольце

А.А. Григорькин¹, С.М. Дунаевский¹, М.А. Пятаев²

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

² *Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия*

Рассеяние частиц зависящим от времени потенциалом в низкоразмерных структурах активно исследуется в течение последних лет [1,2]. В случае, когда периодическое возмущение обусловлено электромагнитным излучением, возникновение фотоиндуцированного тока известно как фотогальванический эффект (ФГЭ).

В данной работе рассматривается ФГЭ в системе, состоящей из одномерного квантового кольца, соединенного одномерными проводниками с двумя электронными резервуарами. Контакты кольца с проводниками рассматриваются как рассеивающие потенциалы нулевого радиуса. Асимметрия системы может быть обусловлена либо геометрией подключения проводников, либо различием рассеивающих свойств «левого» и «правого» контактов. Кольцо освещается монохроматическим излучением, поэтому его гамильтониан гармонически зависит от времени.

В работе предложен метод расчета, позволяющий аналитически вычислить квазиэнергетические электронные состояния в системе с учетом упругого рассеяния на контактах и неупругого взаимодействия с излучением. Найден соответствующий им фотоиндуцированный постоянный ток.

В общем случае фототок обладает сложной зависимостью от параметров системы – частоты излучения, уровня Ферми, положения точек контактов на кольце и длин рассеяния контактов. Разумеется, для фототока характерна периодическая зависимость от магнитного потока через кольцо с периодом, равным кванту потока.

При наличии резонансов Фано в невозмущенных коэффициентах прохождения электромагнитное излучение приводит к появлению двух дополнительных резонансов, смещенных по энергии от основного на величину, равную энергии квантов излучения. При этом основной вклад в ток связан с этими резонансами.

1. Liliana Arrachea, Phys. Rev. B 72, 125349 (2005)
2. Cong Hua Yan, LianFuWei, Physica B, 405, 5 (2010)

Уравнение изгибных колебаний дислокации смешанного типа вблизи точки структурного фазового перехода

В.Н. Нечаев¹, В.В. Дежин²

¹ Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

В настоящем докладе рассмотрены изгибные колебания дислокации смешанного типа, лежащей вдоль оси Oz с вектором касательной к линии дислокации $\vec{\tau}_0 = (0, 0, -1)$, вектором Бюргера $\vec{b} = (b_x, 0, b_z)$ и вектором нормали к плоскости скольжения дислокации $\vec{n} = (0, 1, 0)$. Ограничимся случаем малых колебаний дислокации вблизи положения равновесия. Тогда в линейном по смещению дислокации $u = u(z, t)$ приближении, учитывая заданную ориентацию дислокации, получим $\vec{\tau} = (-\partial u / \partial z, 0, -1)$ и $\delta(\vec{\xi}) = (\delta(x) - \delta'(x)u)\delta(y)$, где $\vec{\xi}$ – двумерный радиус-вектор, отсчитываемый от оси дислокации в плоскости, перпендикулярной вектору $\vec{\tau}$.

Найдено уравнение изгибных колебаний дислокации:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_\perp = & -\frac{2}{3} q_y^2 (b_x q_x + b_z q_z) \left(\frac{3}{1+\nu} + 6\mu g^2 \eta_s^2 \tilde{\chi} \right) \mu \frac{1+\nu}{1-\nu} \times \\ & \times \frac{(b_x q_x + b_z q_z) \tilde{u} + i(2\pi)^2 b_x \delta(q_z) \delta(\omega)}{\left(q^2 - \omega^2 / c_t^2 \right) \left(q^2 - \omega^2 / c_l^2 \right) - 4\mu \frac{1+\nu}{1-\nu} g^2 \eta_s^2 \left(q^2 - \omega^2 / c_t^2 \right)^2 \tilde{\chi}} + \\ & + \frac{\mu \left[b^2 \omega^2 / c_t^2 - (b_x q_x - b_z q_z)^2 \right] \tilde{u} - i(2\pi)^2 \mu b_z^2 q_x \delta(q_z) \delta(\omega)}{q^2 - \omega^2 / c_t^2}. \end{aligned}$$

Здесь $\tilde{f}_\perp = \tilde{f}_\perp(\vec{q}, \omega)$ – Фурье-образ проекции силы Пича-Келера на плоскость скольжения дислокации, \vec{q} – волновой вектор, ω – частота, c_t и c_l – скорости поперечного и продольного звука, ν – коэффициент Пуассона, μ – модуль сдвига, g – постоянный стрикционный коэффициент, η_s – равновесное значение параметра порядка в кристалле без дислокации, $\tilde{u} = \tilde{u}(q_z, \omega)$ – Фурье-образ смещения дислокации,

$\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) = \chi_0 \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 + \kappa q^2 - \omega^2}$ – динамическая восприимчивость,

определяющая отклик однородного кристалла на возмущение параметра порядка.

Обменное взаимодействие в магнитном димере и формирование неколлинеарного магнитного упорядочения в наноструктурах

М.Г. Дудник, В.М. Уздин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Современные исследования методами спин-поляризованной сканирующей туннельной микроскопии позволяют контролировать направления магнитных моментов отдельных атомов. При этом были обнаружены новые типы неколлинеарного магнитного порядка в 3d-кластерах и субмонослойных магнитных структурах на металлических поверхностях. Изучение магнитного упорядочения в таких наносистемах и возможности управлять обменным взаимодействием между отдельными магнитными моментами очень важно для разработки магнитной памяти с ультравысокой плотностью записи.

Для понимания физической природы новых типов магнитного упорядочения важно экспериментальное и теоретическое изучение систем как можно меньшего размера, вплоть до атомного. Такие исследования дают информацию об обменном взаимодействии отдельных магнитных моментов в системах, где магнетизм обусловлен коллективизированными электронами. В работе [1] было экспериментально показано, что моменты атомов железа на ферромагнитно упорядоченных островках Co на поверхности Cu(111) направлены параллельно моментам атомов Co, а моменты атомов Cr – антипараллельно. Хотя это поведение может быть описано в рамках метода функционала плотности, вопрос о том, какие характеристики атомов отвечают за знак обменного взаимодействия остается в первопринципных расчетах открытым, что не позволяет предложить способы управления обменным взаимодействием на атомном масштабе.

Расчеты в рамках неколлинеарного обобщения модели Александера-Андерсона для коллективизированных электронов дают возможность получить более ясную зависимость обменного взаимодействия от микроскопических параметров модели. Число d-электронов и магнитные моменты находятся самосогласованно, методом функций Грина. Кулоновское взаимодействие на узле учитывается в приближении среднего поля [2]. Оказывается, что обменное взаимодействие сильно зависит от числа d-электронов N , локализованных на атоме переходного металла. В случае димеров Fe($N \approx 7$) и Co($N \approx 8$), а также CoFe взаимодействие ферромагнитно а CoCr(8;5) – антиферромагнитно, что согласуется с [1]. Вместе с тем для димера Fe ($N \approx 7$) очень малое уменьшение числа d-электронов, например, за счет взаимодействия с подложкой, может привести к неколлинеарному основному состоянию. Это, возможно, объясняет скирмионное упорядочение, обнаруженное в монослое Fe на Ir(111) [3].

1. Y. Yayan, V.W. Brar, et al., Phys. Rev. Lett., 99, 067202 (2007)
2. P. F. Bessarab, M. G. Dudnik, and V. M. Uzdin. Bull. RAS, Phys., 77, 56 (2013)
3. S. Heinze et al. Nature Physics, 7, 713 (2011)

Асимптотики высоких порядков в полевых моделях

Г.А. Калагов¹, М.Ю. Налимов¹, М.В. Компаниец¹

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

В статье [1] методом ренормгруппового анализа исследовалась равновесная система фермионов с высшим спином. Эффективное действие, описывающее переход имеет вид

$$S = \chi_{ij}(-\Delta)\chi_{ji}^\dagger + \tau \text{Tr}(\chi\chi^\dagger) + \frac{g_1}{2} \text{Tr}((\chi\chi^\dagger)^2) + \frac{g_2}{2} \text{Tr}(\chi\chi^\dagger\chi\chi^\dagger).$$

В однопетлевом приближении установлено, что модель не имеет фиксированных точек. Инвариантные заряды, стартуя с различных начальных значений, пересекают область устойчивости действия приблизительно по одной траектории: в системе реализуется универсальность. Уход траектории за границу области устойчивости интерпретируется как фазовый переход первого рода.

В представленной работе ренормгрупповые бета-функции вычислены в трехпетлевом приближении. Установлено, что в теории не имеется устойчивых фиксированных точек. Уравнения на инвариантные заряды можно строить в форме ϵ -разложения, т.е. по отклонению размерности пространства от логарифмической размерности теории. Для анализа этих уравнений в физических размерностях пространства ($\epsilon=1$, $\epsilon=2$) необходимо проводить их пересуммирование, например по Борелю. Такое пересуммирование требует знание асимптотики высоких порядков (АВП) в теории. АВП найдена методами инстантонного анализа [2], и имеет вид

$$\beta^{(N)} = c N! N^b (-a)^N \left(1 + O\left(\frac{1}{N}\right)\right).$$

Обнаружено, что положение сингулярностей борелевского образа $V(z)$ существенно зависит от структуры инстантона. Кроме того, зависимость радиус сходимости ряда для $V(z)$ от инвариантных зарядов приводит к движению сингулярностей в комплексной плоскости параметра z : особые точки перемещаются с отрицательной вещественной оси на положительную, что приводит к знакопостоянству ряда для $V(z)$.

Численный анализ системы РГ-уравнений с учетом найденной АВП показывает, что характер поведения инвариантных зарядов принципиально не меняется. Это даёт надежды на дальнейшие исследования системы на предмет фазового перехода первого рода.

1. М.В.Комарова, М.Ю.Налимов, Ю.Хонконен ТМФ, 176:1, 89 (2013).
2. Л.Н.Липатов ЖЭТФ, 72, 411 (1977)

***Ab initio* моделирование электронных свойств квазидвухмерных структур халькогенидов переходных металлов V группы**

О.А. Козлова

БГУИР, Минск, Беларусь

Ультратонкие двухмерные структуры слоистых дихалькогенидов переходных металлов (ХПМ) технологически просты в производстве и эффективны в использовании. Структуры, состоящие из одного или нескольких слоев ХПМ, являются прямозонными полупроводниками, значение запрещенной зоны и тип носителя заряда которых, колеблется в зависимости от кристаллографической конфигурации, химического состава и размерности соединений. Таким образом, возможность модификации электронной структуры ХПМ делает их привлекательными для различных приложений микро- и наноэлектроники.

В дополнение к составу и кристаллографической конфигурации атомов в соединениях ХПМ, размерность играет решающую роль в определении их основных электронных свойств [1]. Соединения ХПМ V группы являются узкозонными полупроводниками или полуметаллами, характеризуются низким значением удельного электрического сопротивления ($\sim 10 - 6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$) и периодическим перераспределением в пространстве электронного, ионного и суммарного зарядов (волна зарядовой плотности) [2]. Длина связи М — М в структурах ХПМ V группы изменяется в диапазоне от $3,15 \text{ \AA}$ до $4,03 \text{ \AA}$, в зависимости от размера ионов металла и халькогена. Эти величины на 15-25% больше, чем длины связей, в соединениях переходных металлов твердых веществ, что указывает на ограниченное энергетическое и пространственное перекрытие орбиталей в соединениях ХПМ [3].

Разнообразный физико-химический состав квазидвухмерных структур ХПМ предоставляет множество возможностей для использования электронных и магнитных свойств указанных соединений для широкого круга приложений микро- и наноэлектроники, в частности для устройств хранения энергии, каталитически активных элементов в оптоэлектронике, и в структурных компонентах микроэлектронных приборов. Однако остаются нерешенными ключевые проблемы, связанные с увеличением электрической проводимости и повышением стабильности квазидвухмерных структур, решение которых требует интеграции экспериментальных и теоретических исследований.

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, et. al. Rev. Mod. Phys., 109, 81 (2009).
2. H. Li et al., Small, 63, 8 (2012).
3. M. Chhowalla, H.S. Shin, G. Eda, L.-J. Li, K. P. Loh, H. Zhang, Nature chemistry, 263, 5 (2013).

Нейтронороды реактора ПИК

П.И. Коник^{1,2}, Е.В. Москвин^{1,2}

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

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

В настоящее время в Петербургском Институте Ядерной Физики ведется строительство крупнейшего нейтронного реактора ПИК. Планируется оснастить его большим количеством прибором, многие из которых будут размещены в отдельном нейтронородном зале. Таким образом, приобретает актуальность вопросы проектирования, расчета и оптимизации нейтронородной системы реактора ПИК.

Нынешний проект нейтронородной системы в основном создавался в начале 80-х годов прошлого века и лишь частично был пересмотрен в последние годы. Вместе с тем, за прошедшие 30 лет произошло бурное развитие во многих областях науки и техники, имеющих отношение к нейтронородам. Получили широчайшее распространение высококачественные суперзеркала, значительно увеличивающее критический угол по сравнению с никелем. Была разработана концепция баллистического нейтронорода, на многих нейтронных источниках планируются и строятся эллиптические и параболические нейтронороды. Увеличились доступные вычислительные мощности, что позволяет эффективно использовать численные методы расчета и оптимизации нейтронородов.

Помимо этого претерпела эволюцию приборная база реактора. Новые приборы требует новых пучков с заданными параметрами, а значит и новых нейтронородов. Ведется полная реконструкция одного из горизонтальных каналов, ведущих в нейтронородный зал.

В данной работе мы представляем первые результаты по систематической работе, начатой нами для создания нового образа нейтронородной системы реактора ПИК. Для расчета нейтронородов применяется программный пакет McStas, использующий метод Монте-Карло, отлично себя зарекомендовавший для расчета различных нейтронных установок.

Квазиклассический анализ спектра магнонов в ферромагнетике с основным скирмионным состоянием

С.С. Кравченко^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В недавнее время было экспериментально установлено, что в тонких пленках магнетиков с сильной перпендикулярной анизотропией типа легкая ось, вектора намагниченности, при определенных условиях, могут самоорганизовываться, образуя вихревые кластеры. Импульсным воздействием магнитного поля лабиринтная доменная структура разрушаясь преобразовывалась в структуры центрального типа, такие как спиральные домены и домены с высокой степенью трансляционной и ориентационной упорядоченностью [1], которые можно наблюдать, используя магнитооптический эффект Керра. Такие структуры не исчезают сразу при выключении магнитного поля, их можно рассматривать как стабильные магнитные дефекты в ферромагнетике. Как было показано в работе [2], такие дефекты удовлетворяют минимуму энергии обменного взаимодействия.

Экспериментальное подтверждение существования топологически нетривиальных спиновых конфигураций – скирмионов – вызвало большой интерес в фундаментальных исследованиях. Скирмионы больших радиусов, порядка 100 элементарных векторов трансляции, экспериментально наблюдались в тонких пленках TbFeCo [2].

В этой работе впервые сделана попытка проанализировать квазиклассическим методом спектр магнонов, взяв за начальную конфигурацию скирмионное состояние ферромагнетика, в результате которой было получено спектральное уравнение на волновую функцию магнона, которое можно решить численно, а также получено аналитическое решение этого уравнения для нулевых значений энергий.

1. G. S. Kandaurova and A. E. Sviderski, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47, 410 (1988) [JETP Lett. 47, 490 (1988)]
2. T. Ogasawarav, N. Iwata, Y. Marakami, H. Okamoto, and Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. 94, 162507 (2009).

Угловая зависимость магнитосопротивления в сильно анизотропных квазидвумерных металлах при различных формах уровней Ландау

Т.И. Могилюк¹, П.Д. Григорьев²

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Черногоровка, Россия

Слоистые проводники образуют широкий класс различных соединений и структур, обладающих уникальными свойствами. К ним относятся все высокотемпературные сверхпроводники, включая купраты и пниктиды, органические металлы и сверхпроводники, гетероструктуры, интеркалированный графит, и др.

Имеется два основных метода экспериментального определения электронной структуры слоистых проводников: измерение фотоэмиссии электронов с угловым разрешением (ARPES) и измерение магнитосопротивления, включающее угловые и квантовые осцилляции. Угловые и квантовые осцилляции магнитосопротивления позволяют определить геометрию поверхности Ферми, закон дисперсии электронов, их эффективную массу, форму и уширение электронных уровней, g -фактор электронов, и т.д. Для извлечения этих данных необходимо достоверное теоретическое описание этих явлений. Однако стандартная теория магнитосопротивления в квантующем поле, разработанная для обычных трехмерных металлов, оказывается не применимой (или применимой только качественно, но не количественно) для сильно анизотропных слоистых материалов, у которых ширина зоны в межслоевом направлении сравнима по величине или меньше циклотронной энергии. Волны зарядовой и спиновой плотности, которые часто образуются в сильноанизотропных соединениях, также вносят существенные изменения в поведение магнитосопротивления.

Вычислена угловая зависимость магнитосопротивления в сильно-анизотропных квазидвумерных металлах для монотонной и осциллирующей частей проводимости. Угловая зависимость амплитуд магнитных квантовых дается произведением полученного ранее спинового множителя и нового множителя, который имеет нетривиальную угловую зависимость. Угловая зависимость проводимости различна для разных форм уровней Ландау. Например, для Гауссовой формы уровней Ландау угловые осцилляции магнитосопротивления имеют заметно большую амплитуду, чем для Лоренцевской формы уровней Ландау. Предложен также способ получения спинового тока, что может иметь приложения в спинтронике.

1 T.I. Mogilyuk, P.D. Grigoriev, arXiv: 1309.3161.

Псевдо- ϵ -разложение и нелинейные восприимчивости ферромагнетиков в критической области

М.А. Никитина, А.И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В окрестности точки Кюри ферромагнетик представляет собой сильно нелинейную систему. Нелинейные восприимчивости χ_4, χ_6, \dots здесь аномально велики и степенным образом зависят от $|T - T_c|$. Их амплитуды универсальны и определяются критическими асимптотиками эффективных констант связи g_{2k} . Отношения этих констант $R_{2k} = g_{2k}/g_4^{k-1}$ входят в разложение свободной энергии по степеням безразмерной намагниченности z

$$F(z, T) - F(0, T) = (m^3/g_4)(z^2/2 + z^4 + R_6 z^6 + R_8 z^8 + \dots) \quad (1)$$

и, соответственно, в скейлинговое уравнение состояния.

В работе вычисляются критические значения g_4, g_6, g_8, R_6 и R_8 для изингов-ских и гейзенберговских ферромагнетиков методом псевдо- ϵ -разложения. За основу взяты шестипетлевые ренормгрупповые (РГ) ряды для β -функции трех-мерной $O(n)$ -симметричной модели [1,2] и четырех- и трехпетлевые разложения для констант g_6 и g_8 [3,4]. Псевдо- ϵ -разложение для g_6 при $n = 1$ имеет вид:

$$g_6 = (8\pi^2/81) \tau^3 + 0.58566773 \tau^4 + 0.10148872 \tau^5 - 0.0229712 \tau^6. \quad (2)$$

Остальные псевдо- ϵ -разложения, кроме рядов для R_8 , также имеют коэффициенты, значительно меньшие, чем у исходных РГ разложений, и быстро убывающие с номером члена ряда. Это позволяет находить численные значения искомым величин, используя простейшие методы обработки расходящихся рядов – технику аппроксимант Паде и прямое суммирование с обрывом на оптимальном члене. Так, для гейзенберговских ферромагнетиков указанные методы дают $g_4 = 0.796$ и $g_4 = 0.802$, тогда как наилучшей РГ оценкой сегодня считается $g_4 = 0.794$ [5]. Для модели Изинга суммированием по Паде псевдо- ϵ -разложений для R_6 и g_6 мы получили $R_6 = 1.642$ и $R_6 = 1.658$. Усреднение этих оценок ведет к $R_6 = 1.650$, числу, почти совпадающему с результатом последних расчетов на решетках $R_6 = 1.649 \pm 0.002$ [6]. Численные оценки R_8 оказываются не столь оптимистичными, что объясняется не только меньшей длиной псевдо- ϵ -разложений, но и особенностями структуры исходных РГ рядов [4].

1. G. A. Baker, B. G. Nickel, D. I. Meiron, Phys. Rev. B 17, 1365 (1978).
2. S. A. Antonenko, A. I. Sokolov, Phys. Rev. E 51, 1894 (1995).
3. А. И. Соколов, ФТТ, 40, 1284 (1998);
4. A. I. Sokolov, E. V. Orlov, V. A. Ul'kov et al., Phys. Rev. E 60, 1344 (1999).
5. R. Guida, J. Zinn-Justin, J. Phys. A 31, 8103 (1998).
6. P. Butera, M. Pernici, Phys. Rev. B 83, 054433 (2011).

Квазиклассическое квантование и фаза Берри в графене и бислое

А.Ю. Озерин¹, Л.А. Фальковский^{2, 1}

¹ *Институт физики высоких давлений им. Верецагина, Троицк, Россия*

² *Институт теоретической физики им. Ландау, Черногловка, Россия*

Наиболее подробные сведения о структуре спектра металлов и полупроводников получаются из исследований уровней Ландау в магнито-оптических и магнито-транспортных экспериментах. Однако, не всегда можно теоретически определить спектр в магнитном поле, как например в случае графеновых слоев.

Для бислоя и графита эффективный гамильтониан представляет собой матрицу 4×4 , дающую четыре ветви закона дисперсии. При учете сравнительно малой поправки, тригонального искажения, форма сечения закона дисперсии значительно меняется. Другим важным параметром в бислое является управляемая щель. В этих условиях, точное описание спектра в магнитном поле становится достаточно сложным.

С другой стороны, можно применить метод квазиклассического квантования. В данной работе описывается процедура построения квазиклассического решения гамильтониана, линейного по импульсу, вычисляются поправки в правило квантования Бора-Зоммерфельда.

$$\frac{c}{e \hbar B} S(\epsilon) = 2\pi \left(n + \frac{\nu}{4} + \delta(\epsilon) \right)$$

Для бислоя получено явное выражение для фазы Берри в пренебрежении тригональными искажениями и описана численная процедура для общего случая.

1. M.V. Berry, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **392**, 45 (1984).
2. L.A. Falkovsky, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 609 (1965).
3. A. Yu. Ozerin, L.A. Falkovsky, Phys. Rev. B **85**, 205143 (2012).

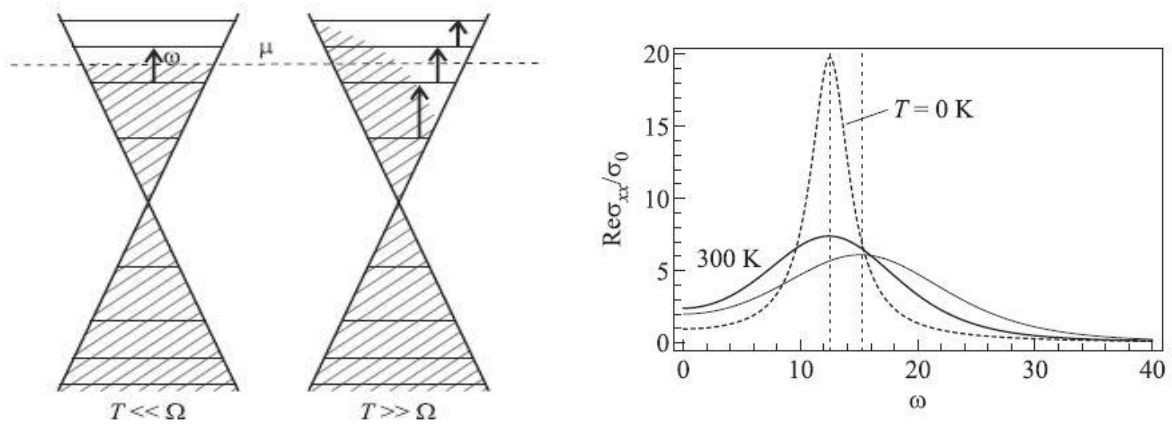
Динамическая проводимость графена

А.Ю. Озерин

Институт физики высоких давлений им. Верещагина, Троицк, Россия

Циклотронный резонанс позволил подробно изучить спектры металлов и полупроводников. Помимо измерения эффективной массы носителей и формы ферми-поверхности, исследуя форму пика поглощения при разных температурах можно так же установить преобладающий механизм рассеяния.

В отличие от систем с параболическим спектром, уровни Ландау в графене располагаются не эквидистантно, что должно приводить к интересным особенностям циклотронного резонанса: явной зависимости ширины пика от температуры и множественным пикам при высоких температурах.



Данная работа посвящена исследованию внутризонной проводимости графена на разных частотах в присутствии магнитного поля с учетом температуры. В условиях применимости квазиклассического приближения получены оценки на величину проводимости в разных случаях.

Помимо кратного циклотронного резонанса в работе исследуются осцилляции Шубникова-де Гааза.

1. R.B. Dingle, Proc. Roy. Soc. London A **211**, (1952).
2. А.А. Абрикосов, Основы теории металлов, М., Физматлит (2009).
3. M. Orlita, I. Crassee, C. Faugeras et al, New Journal of Phys. **14**, 095088 (2012).
4. L.A. Falkovsky, A.A. Varlamov, Eur. Phys. J. B **56**, 281 (2007).
5. А.Ю. Озерин, Письма в ЖЭТФ, т. **98**, вып. 12, 943-946, (2013).

Операторы симметрий для линейных моделей наноструктур

В.Н. Робук

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
ИЭРТ НАНУ, Харьков, Украина*

Дан беглый обзор по публикациям (всего около трёхсот публикаций), в которых, для моделирования физико-механических процессов в различных наноструктурах, используются линейные однородные дифференциальные уравнения в частных производных с постоянными коэффициентами. Для всех этих дифференциальных уравнений и систем таких уравнений оказывается возможным построение конструктивных операторов симметрий. Т. е. таких операторов симметрий, которые путём последовательного применения, к какому либо аналитическому решению данной модели, дают бесконечную серию аналитических решений этой же модели. Продемонстрировано несколько конкретных примеров.

Класс универсальности Изинга-Гейзенберга в трехмерных фрустрированных магнитных системах

А.О. Сорокин

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В магнитных системах реализуются различные сценарии нарушения симметрии, многообразие которых наблюдается благодаря фрустрации. Так в антиферромагнетике на объемноцентрированной кубической решетке из-за конкуренции обменов между ближайшими и следующими за ближайшими спинами возникает коллинеарный порядок, который описывается не только намагниченностью подрешеток, но и дополнительным дискретным (изинговским) параметром. Этому же классу принадлежит антиферромагнетик на простой кубической решетке с дополнительным обменом в слое между спинами второго порядка дальности.

Данные модели исследовались с помощью численного моделирования как для планарных ($N=2$), так и изотропных ($N=3$) спинов. В них наблюдается температурный переход одновременно и по непрерывному, и по дискретному параметрам порядка. В $N=2$ случае показано, что данный переход слабого первого рода, и наблюдается псевдоскейлинговое поведение. В этом случае класс универсальности совпадает с классом магнетиков с планарным порядком, например, спиральных магнетиков [1]. Найденные критические показатели согласуются для этих классов.

В $N=3$ случае также наблюдается псевдоскейлинговое поведение с уникальными индексами. Тем не менее ренормгрупповой анализ показывает, что в классе Изинга-Гейзенберга должен происходить либо индуцированный флуктуациями переход первого, либо наблюдаться мультикритическое поведение для всех $N \geq 2$.

1. А.О. Сорокин, ЖЭТФ **145**, 481 (2014).

Дефекты в димерных спиновых жидкостях

О.И. Утесов¹, А.В. Сизанов^{2, 1}, А.В. Сыромятников^{2, 1}

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

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

В последнее время большой интерес вызывают свойства так называемых квантовых спиновых жидкостей – веществ с конечной корреляционной длиной при нулевой температуре и щелью в спектре возбуждений. Такими свойствами обладают, например, димерные системы, которые состоят из пар атомов – димеров - обладающих ненулевым магнитным моментом связанных сильным обменным взаимодействием и слабым междимерным взаимодействием между парами. Эффективная размерность системы определяется геометрией междимерных взаимодействий, известны примеры димерных веществ всех размерностей.

Димерные вещества с произвольной размерностью успешно описывались обменным гамильтонианом – моделью Гайзенберга. Однако, как известно, идеальных кристаллов в реальности не существует, в веществе всегда присутствуют дефекты разного типа, и важной задачей является исследование их влияния на систему. Оказалось, что в магнетиках помимо простой замены магнитных ионов на немагнитные есть еще другой способ создания беспорядка – замена атомов вовлеченных в суперобменное взаимодействие. Таким образом, при математическом описании необходимо рассматривать обменный гамильтониан со случайными константами взаимодействия.

Нами были рассмотрены случаи димерных систем различной размерности с дефектами внутридимерных обменов, а также рассмотрен случай одномерной спиновой лестницы с дефектами междимерных обменов. В рамках стандартного подхода [1] примененного при малых концентрациях дефектов были посчитаны поправки к спектрам элементарных возбуждений, получены выражения для их затухания в зависимости от волнового вектора, а также влияние на плотность состояний системы и получены условия на образование дискретных уровней или резонансных состояний в непрерывном спектре. Проведенный численный анализ подтвердил полученные аналитически зависимости.

1. Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев, Теория магнито-упорядоченных кристаллов с примесями, М.: «Наука» (1970).

Фазовые переходы и диффузное рассеяние

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

¹ ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

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

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

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

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

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

Дополнительные материалы

Modern Trends in Area Detectors for Single-Crystal and Powder Neutron Diffraction

A. Gukasov

Leon Brillouin laboratory , CEA-CNRS, CE de Saclay, Gif sur Yvette, France

Neutron single-crystal diffraction is the tool of choice to determine the accurate positions of hydrogen atoms in solids and the arrangements of magnetic moments. In some cases, hydrogen positions can be inferred from the positions of the other atoms, but if hydrogen bonding occurs, this is not reliable. Since neutron fluxes are typically low compared to those available at synchrotron X-ray facilities, there has been a major effort to maximize the exploitation of the available scattering data. Much emphasis has been placed in particular on the provision of large area detector systems. The D19 diffractometer at the ILL which has been equipped with a 120° x 32° multiwire proportional counter since 2007 provides greatly improved data quality for crystallographic work in structural chemistry, physics and the biosciences. Another slightly less precise single-crystal diffraction method is the Laue method where the crystal is illuminated by a broad spectrum of wavelengths, and a large area of neutron-sensitive

Image plates (VIVALDI at the ILL, KOALA at ANSTO) is used to measure the diffraction spots. Recently a CCD-based Laue diffractometer, CYCLOPS at the ILL, has been constructed which should provide a unique possibility for real-time exploration of reciprocal space and rapid data collection through phase transitions due to its fast readout system. Finally the Very Intense Polarized neutron diffractometer (VIP) at the LLB which combines a large area detector and a hot polarized neutron beam shows an unprecedented efficiency in the measurement of spin densities. In this talk a review of neutron instruments with area detectors, the receipts of the data reduction and trends of their development will be given.

Что можно узнать о магнетизме из зонных расчетов

А. Яресько

MPI for Solid State Research, Stuttgart, Germany

Обобщение теории функционала электронной плотности на случай спин-поляризованных систем Бартом и Хедином положило начало исследованиям магнитных свойств веществ с помощью высокоэффективных методов расчетов, основанных на приближении локальной спиновой плотности. В этой лекции я напомню, как магнитное решение описывается в теории функционала плотности, и сделаю короткий обзор современных подходов к расчетам магнитных систем, которые позволяют, в частности, изучать кристаллы с несоразмерной магнитной структурой, оценивать параметры эффективного магнитного Гамильтониана, рассчитывать спектры магнитных возбуждений. В качестве примеров будут приведены результаты расчетов для пниктидов железа и соединений с геометрическими фрустрациями.

Список участников

ФИО	Институт	e-mail	стр.
Dudnik Mayya Gennad`evna	СПбГУ	mayyag.dudnik@gmail.com	170
Matasov Maxime	SSU	pooryork86@gmail.com	
Nesvizhevsky Valery	ILL	nesvizhevsky@ill.eu	37
Rogalev Andrei	ESRF	rogalev@esrf.fr	
Zhernenkov Kirill	CEA-Grenoble	zmnzkn@mail.ru	
Абасзаде Рашад Габил оглы	НАНА	Abaszade@rambler.ru	164
Абрамовский Алексей Леонидович	МГИУ	sync757-92@yandex.ru	
Абубакаров Абу Геланиевич	ЮФУ	abubakarov12@mail.ru	132
Аветисов Владик Аванесович	ИХФ РАН	vladik.avetisov@gmail.com	39
Азимов Яков Исаакович	ПИЯФ НИЦ КИ	azimov@thd.pnpi.spb.ru	4
Аксенов Виктор Лазаревич	ПИЯФ НИЦ КИ	dir@pnpi.spb.ru	6
Аксенов Сергей Михайлович	ИК РАН	aks.crys@gmail.com	
Аксенов Сергей Николаевич	ИЯИ РАН	serg.asd@mail.ru	49
Алигулиева Хаяла Вагиф	НАНА	xayala-firuza@mail.ru	133
Алисултанов Заур	Институт физики ДНЦ РАН	zaur0102@gmail.com	
Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@lns.pnpi.spb.ru	50,51
Алыев Юсиф Имрайылоглу	БакИПК и ППК	yusifafshar@gmail.com	134
Ангелов Борислав	ИМС	bsangelov@yahoo.com	78

Андреев Всеволод Владимирович	ЧГУ	andreev_vsevolod@mail.ru	135
Андроникова Дарья	СПБГПУ	andronikova.daria@gmail.com	79
Анохин Андрей	ЮНЦ РАН	anokhin.andrey@gmail.com	
Арефьев Михаил Игоревич	СПбГУ	arefievm@mail.ru	136
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dmitri.aristov@gmail.com	
Аскеров Эльмар Багир Оглы	ОИЯИ	elmar@jinr.ru	52
Асланов Леонид Александрович	МГУ им. М.В. Ломоносова	aslanov@struct.chem.msu.ru	29
Афонин Алексей	ИЯИ РАН	afonin@inr.ru	53
Бакиева Ольга Ринатовна	ФТИ УрО РАН	ftiran@mail.ru	137
Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	28
Баталов Лев Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	zlokor88@gmail.com	165
Баталова Анастасия Александровна	СПбГУ	batalova.phys@gmail.com	
Баянов Глеб Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	gleb_eto_ya@mail.ru	
Белов Дмитрий Владимирович	Amsterdam Scientific Instruments	dbyelov@gmail.com	
Бобриков Иван Анатольевич	ОИЯИ	bobrikov@nf.jinr.ru	15
Боднар Станислав Юрьевич	СПбГУ	stasbodnar@mail.ru	
Боднарчук Виктор Иванович	ОИЯИ	bodnarch@nf.jinr.ru	
Боркунов Родион Юрьевич	БФУ им. И. Канта	rborkunov@mail.ru	
Бочаров Дмитрий	Латвийский университет	bocharov@latnet.lv	166
Будкин Григорий Владимирович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	gbudkin@gmail.com	

Будкина Наталья Сергеевна	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	pro100pro100@rambler.ru	
Булавин Максим Викторович	ОИЯИ	bulavin85@inbox.ru	
Булат Сергей Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	bulat@omrb.pnpi.spb.ru	40
Бурко Вероника Андреевна	БГУИР	veranika.burko@gmail.com	167
Быков Алексей Анатольевич	СПбГУ	redi87@bk.ru	99
Быков Виктор Анатольевич	Имет УрО РАН	wildrobert@gmail.com	100
Быстрова Анна Владимировна	ИТЭБ	aniria2003@mail.ru	80
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	81
Васильева Людмила Анатольевна	ЧГУ	ask_lyuda@mail.ru	
Васюков Денис Михайлович	ИК РАН	vasyukov@physics.msu.ru	101
Вахрушев Сергей Борисович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	s.vakhrushev@mail.ioffe.ru	
Вашченков Виктор Эдуардович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	vikvas@mail.ioffe.ru	156
Ведь Михаил Владиславович	ННГУ им. Н.И. Лобачевского	Dark.89_RUS@mail.ru	
Вежлев Егор	ПИЯФ НИЦ КИ	vezhlev@pnpi.spb.ru	
Величко Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgen.velichko@lns.pnpi.spb.ru	54,55
Вербицкий Николай	University of Vienna	dr.haider.est@gmail.com	35
Волков Василий Владимирович	СамГУ	volvvv@mail.ru	82
Воронин Владимир	ПИЯФ НИЦ КИ	vvv@pnpi.spb.ru	14
Воронина Елена Валентиновна	КФУ	evoronina2005@yandex.ru	157
Гаврилов Виктор Николаевич	ГНЦ РФ ФЭИ	mdmitry@delfi.lv	56

Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	gavrilov@pnpi.spb.ru	
Галимзянов Руслан Равильевич	НИТУ МИСИС	gal_ruslan@yahoo.com	102
Гапон Игорь Васильевич	ОИЯИ	gapon@jinr.ru	
Гартвик Андрей Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gartwik@mail.ru	
Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gerashch@pnpi.spb.ru	
Гинзбург Саул Лейбович	ПИЯФ НИЦ КИ	ginzbsl@mail.ru	
Голосовский Игорь Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	golosov@mail.pnpi.spb.ru	
Гончарова Анна Сергеевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	goncharoAS@gmail.com	103
Горбатова Полина Александровна	КФУ	gpolinaa@mail.ru	104
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	12,19
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Григорькин Алексей Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ale-grig@yandex.ru	168
Гриценко Юлия Витальевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	guv108@mail.ru	
Грунин Алексей Игоревич	БФУ им. И. Канта	agrunin@innopark.kantiana.ru	83
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	105
Гукасов Арсен	LLB	arsen.goukassov@cea.fr	
Гусейнов Гусейн Джалил	Институт Физики НАН РА	huseyn-1978@mail.ru	106
Дангилова Гульмира Амангельдиевна	ЕНУ им. Л.Н. Гумилева	gumik__93@mail.ru	
Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	169
Демишев Сергей Васильевич	ИОФ РАН	demis@lt.gpi.ru	17

Джабаров Сакин Гамид оглы	ОИЯИ	sakin@jinr.ru	57
Димакова Елизавета	ПИЯФ НИЦ КИ	lisabeta777@mail.ru	
Дмитриев Алексей Иванович	ИПХФ РАН	aid@icp.ac.ru	138
Дмитриев Артем Владимирович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	art41090@gmail.com	158
Дмитриев Владимир Петрович	ESRF	dmitriev@esrf.fr	
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	20
Досовицкий Георгий Алексеевич	НеоХим, ЗАО	george.dos@gmail.com	107
Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	32167i@mail.ru	84
Дядькин Вадим Александрович	ESRF	dyadkin@lns.pnpi.spb.ru	18
Дядькина Екатерина Анатольевна	ПИЯФ НИЦ КИ	katy@lns.pnpi.spb.ru	
Евстигнеева Надежда Викторовна	НовГУ	Nadya1203.89@mail.ru	
Ездакова Ксения	ПИЯФ НИЦ КИ	voroninakv@lns.pnpi.spb.ru	85,108
Екимов Константин Анатольевич	ПетрГУ	ekostq@mail.ru	
Екимова Татьяна Анатольевна	ПетрГУ	dery77@mail.ru	86
Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	eliseev@inorg.chem.msu.ru	36
Ельникова Лилия Вячеславовна	ГНЦ РФ ИТЭФ	elnikova@itep.ru	159
Ермаков Роман Павлович	НЦВО РАН	x-ray_diffraction@mail.ru	
Ершов Петр Александрович	БФУ им. И. Канта	fofan89@gamil.com	87
Жакупова Асем Кабанбайкызы	ЕНУ им. Л.Н. Гумилева	assem-vip@mail.ru	

Зеленина Мария Сергеевна	БГУИР	pooliateen@mail.ru	
Зо Лин Чжо	СПбГУ	kyawzawlinn.49@gmail.com	58
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	zobkalo@pnpi.spb.ru	41
Иванов Дмитрий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	d.ivanov@phys.spbu.ru	
Иванова Наталья Анатольевна	НИЯУ МИФИ	uran-o2@yandex.ru	139
Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН	ivitcheva@mail.ru	109
Иносов Дмитрий Сергеевич	Технический ун-т Дрездена	dmytro.inosov@tu-dresden.de	
Иоффе Александр	JCNS@MLZ	a.ioffe@fz-juelich.de	
Исмаилов Наурызжан Муратович	ЕНУ им. Л.Н. Гумилева	nurik-2492@mail.ru	
Исмиева Севиндж Али	Институт физики НАН РА	Sevinc_Ismiyeva@mail.ru	
Исхакова Людмила Дмитриевна	ИЦВО РАН	Ldisk@fo.gpi.ru	
Ищенко Татьяна Васильевна	ИОФ РАН	demis@lt.gpi.ru	140
Казамбаева Айслуу Каирбековна	ЕНУ им. Л.Н. Гумилева	icelusha_92@mail.ru	
Калагов Георгий Алибекович	СПбГУ	ktkp@mail.ru	171
Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	141
Калюканов Андрей Игоревич	Филиал ОАО "НИФХИ им.Л.Я.Карпова"	kalyukanov@mail.ru	142
Канюков Егор Юрьевич	ГО НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	ka.egor@mail.ru	31
Карпов Иван Дмитриевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	fizic32@yandex.ru	
Касимзаде Тубуханум Эльман КЫЗЫ	НАНА	nushana_kasimova@yahoo.com	

Кибалин Юрий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	yurikibalin@gmail.com	
Киселев Игорь Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kisselev@omrb.pnpi.spb.ru	
Киселев Михаил	ICTP	mkiselev@ictp.it	
Киямов Айрат Газинурович	КФУ	airatphd@gmail.com	143
Клементьев Евгений Станиславович	ИЯИ РАН	clement@inr.ru	9
Климонт Анастасия Александровна	НИТУ МИСиС	nklimont@gmail.com	
Клюева Мария	НИТУ МИСиС	23sh82vd@gmail.com	32
Ковалев Анатолий Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kovalev@pnpi.spb.ru	144
Козинкина Елена Александровна	ЮФУ	y_kozinkina@mail.ru	
Козлова Ольга Александровна	БГУИР	olga.bsuir@gmail.com	172
Кондулукова Дарья Александровна	СПбГПУ	dasha557755@mail.ru	
Коневцова Ольга Викторовна	ЮФУ	khelgla@yandex.ru	160
Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	173
Коновалов Олег Вениаминович	ESRF	konovalo@esrf.fr	21
Кононихина Виктория Витальевна	УГГУ	Airotkiw@yandex.ru	
Коньгин Григорий Николаевич	ФТИ УрО РАН	gnkon@mail.ru	
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@lns.pnpi.spb.ru	42
Коржик Михаил Васильевич	НИИ ЯП БГУ	Mikhail.Korjik@cern.ch	10
Кошкודהев Дмитрий Сергеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	koshkodaev.d.s@gmail.com	110
Кравцов Евгений Алексеевич	ИФМ УрО РАН	kravtsov@imp.uran.ru	

Кравченко Сергей Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ks-spb@mail.ru	174
Кречетов Илья Сергеевич	НИТУ МИСиС	ilya_krechetov@mail.ru	
Кривовичев Сергей Владимирович	СПбГУ	s.krivovichev@spbu.ru	
Круглов Александр Александрович	ОИЯИ	obis@list.ru	
Куликова Татьяна	Имет УрО РАН	kuliko@gmail.com	33
Кунцевич Андрей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kuncevich_andrei@mail.ru	
Курбаков Александр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	kurbakov@pnpi.spb.ru	44
Кучугура Мария Дмитриевна	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	mariya_kuchugura@mail.ru	59
Лазебник Иосиф Моисеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	lazebnik@pnpi.spb.ru	
Лазута Александр	ПИЯФ НИЦ КИ	alexandr@VL9467.spb.edu	
Лебедев Виктор Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	lebedev@pnpi.spb.ru	45
Лебедев Егор Александрович	НИУ МИЭТ	dr.beefheart@gmail.com	
Леонтьев Алексей Павлович	МГУ им. М.В.Ломоносова	solnyshco_rshi@mail.ru	111
Лихацкий Максим Николаевич	ИХХТ СО РАН	lixmax@icct.ru	
Лихолетова Елена Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	likholetova@lns.pnpi.spb.ru	
Лобанов Денис Игоревич	УрФУ	Lzq@66.ru	145
Лобанова Инна Игоревна	ИОФ РАН	inna_lobanova@bk.ru	146
Логинов Дмитрий Владимирович	ПетрГУ	logindm@mail.ru	22
Лозовая Ольга Владимировна	ООО "Ё-Инжиниринг"	lozovaya@yo-auto.ru	
Луговской Андрей Вячеславович	НИТУ МИСиС	andrey.lugovskoy@gmail.com	112

Лупицкая Юлия Александровна	ЧелГУ	Lupitskaya@gmail.com	147
Львов Дмитрий Владимирович	ГНЦ РФ ИТЭФ	lvov@itep.ru	60
Любомирский Михаил	ESRF	lyubomir@esrf.fr	23
Лянгузов Николай Владимирович	ЮФУ	n.lianguzov@mail.ru	148
Лятун Иван Игоревич	БФУ им. И. Канта	ivanlyatun@innopark.kantiana.ru	88
Мададзада Афаг Иса Кызы	ОИЯИ	madadzada@jinr.ru	113
Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	maleyevsv@mail.ru	5
Мамедов Джавид Вахидович	КФУ	javi-m@yandex.ru	114
Марачевский Валерий Николаевич	СПбГУ	maraval@mail.ru	
Маркова Юлия Николаевна	ИГХ	markova.julia.igc@yandex.ru	89
Масленникова Александра Евгеньевна	КФУ	mandarinka1311@gmail.com	115
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	116
Медведева Светлана Сергеевна	БФУ им. И. Канта	smedvedeva@innopark.kantiana.ru	24
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	61
Митин Дмитрий Михайлович	СГУ	mitindm@mail.ru	117
Михейкин Алексей Сергеевич	ЮФУ	a.mikheykin@sfnu.ru	90
Мищенко Илья Никитич	ФТИАН	IlyaMischenko@rambler.ru	161
Могилюк Тарас Игоревич	НИЦ "Курчатовский институт"	5taras@mail.ru	175
Морозов Максим Сергеевич	СамГУ	maxymor@mail.ru	

Москвин Евгений	ПИЯФ НИЦ КИ	mosqueen@pnpi.spb.ru	11
Муравьев-Смирнов Сергей Сергеевич	НИЯУ МИФИ	SSMuravyevsmirnov@mephi.ru	118
Мухин Константин Александрович	JСNS	kostik001@mail.ru	
Мушенок Федор Борисович	ИПХФ РАН	mushenokf@ya.ru	149
Нагорный Анатолий Васильевич	ОИЯИ	avnagorny@jinr.ru	62
Напольский Кирилл Сергеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	knapolsky@gmail.com	
Незванов Александр Юрьевич	МГИУ	alexnezv@gmail.com	
Неудачина Вера Сергеевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	vera_neudachina@mail.ru	
Нигъматуллина Ильсияр Илдусовна	КФУ	nigmatullina88@yandex.ru	150
Никитина Маргарита Александровна	СПбГУ	margaritnikitina@yandex.ru	176
Никоноров Андрей Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	AndreyNikonorov@yandex.ru	
Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyankov_a_k@mail.ru	
Озерин Алексей Юрьевич	ИФВД РАН	m12sl@yandex.ru	177,178
Окороков Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov@pnpi.spb.ru	
Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv@samsu.ru	119
Островский Борис Исаакович	ИК РАН	ostr@cea.ru	30
Павленко Анатолий Владимирович	НИИФ ЮФУ	tolik_260686@mail.ru	120
Павлов Константин Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	orbita.pk@lns.pnpi.spb.ru	63
Папушкин Игорь Викторович	ОИЯИ	piv@nf.jinr.ru	64
Петржик Андрей	ИРЭ РАН	petrzhik@hitech.cplire.ru	65

Петров Сергей Николаевич	СПбГУ	sergeypspb@mail.ru	121
Пивоварова Юлия Владимировна	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	yuliapvl@gmail.ru	162
Письменный Владимир Викторович	БФУ им. И. Канта	Filth-@mail.ru	
Платунов Михаил Сергеевич	ИФ СО РАН	platunov@iph.krasn.ru	25
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pnk@pnpi.spb.ru	
Подчезерцев Станислав Юрьевич	УрФУ	stpcz@mail.ru	122
Покоев Александр Владимирович	СамГУ	pokoev@samsu.ru	
Поликарпов Максим Валерьевич	НИЯУ МИФИ	polikarpov.maxim@mail.ru	91
Попова Елена Алексеевна	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	elena.popova566@gmail.com	151
Попюк Татьяна Валерьевна	ОИЯИ	shevchenk2o09@yandex.ru	
Потапкина Марина Юрьевна	ТулГУ	m_potapkina@mail.ru	123
Пряничников Степан Викторович	Имет УрО РАН	stepian@yandex.ru	
Разумная Анна Григорьевна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	
Райтман Эрнст Аронович	ГНЦ РФ ФЭИ	eraitmans@apollo.lv	66
Редьков Алексей Викторович	СПбАУ, ФТИ им. А.Ф. Иоффе	red-alex@mail.ru	
Робук Виктор Николаевич	ОИЯИ	robuk@jinr.ru	179
Росляков Илья Владимирович	МГУ им. М.В. Ломоносова	ilya.roslyakov@gmail.com	152
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov@pnpi.spb.ru	
Рунова Маина Константиновна	ПИЯФ НИЦ КИ	runova@pnpi.spb.ru	
Руткаускас Антон Владимирович	ОИЯИ	ranton@nf.jinr.ru	153

Рыбин Дмитрий Станиславович	ФТИ УрО РАН	dsrybin@mail.ru	
Рыжов Вячеслав Анатолевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	
Рымбекова Айерке Кайраткызы	ЕНУ им. Л.Н. Гумилева	aierke_92@mail.ru	
Рябухина Марина Викторовна	ИФМ УрО РАН	ryabukhina@imp.uran.ru	67
Савин Валерий Васильевич	ТюмГУ	savinvaleriy@rambler.ru	154
Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ НИЦ КИ	savitska@inbox.ru	38
Садыков Равиль Асхатович	ИЯИ РАН	rsadykov@inr.ru	68
Сазонов Андрей	JCNS@MLZ	mail@sazonov.org	69
Самарцев Илья Владимирович	ННГУ	woterbox@mail.ru	
Самойленко Сергей Александрович	ОИЯИ	samoilenko_pp@mail.ru	70
Сарапин Глеб Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	sarapin.gleb@gmail.ru	
Саунина Светлана Ивановна	ЧелГУ	saunina@csu.ru	92
Сизанов Алексей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	alexey.sizanov@gmail.com	
Симоненко Елизавета Петровна	ИОНХ РАН	ep_simonenko@mail.ru	
Симоненко Николай Петрович	ИОНХ РАН	n_simonenko@mail.ru	34
Скуратов Виталий Алексеевич	ОИЯИ	Vitaly77770@mail.ru	
Смирнов Олег Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	osmirnov@pnpi.spb.ru	46
Смыслов Руслан Юрьевич	ИВС РАН	urs1968@gmail.com	
Снигирев Анатолий Александрович	ESRF	snigirev@esrf.fr	
Соколов Александр Иванович	СПбГУ	ais2002@mail.ru	

Соколов Роман Александрович	НИТУ МИСиС	Sokolovrmn@gmail.com	
Соллаку Агим	Университет им. Аристотеля в Салониках	xristossollaku@gmail.com	
Сомов Евгений Сергеевич	СПбГУ	somov.evgeny@mail.ru	
Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	aosorokin@gmail.com	180
Столяров Андрей Андреевич	ИЯИ РАН	feryazkino@rambler.ru	71
Сулейманов Наиль Муратович	КФТИ КазНЦ РАН	nail.suleimanov@mail.ru	
Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ НИЦ КИ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	svg@pnpi.spb.ru	47
Таланов Михаил Валерьевич	ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	124
Тарнавич Владислав Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	72
Таровик Эрнест Григорьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	yurka@lns.pnpi.spb.ru	
Толбанов Олег Петрович	ТГУ	top@mail.tsu.ru	27
Томчук Александр Васильевич	ОИЯИ	tomchuk@jinr.ru	125
Томчук Алина Алексеевна	ОИЯИ	a.kaznacheevskaya@mail.ru	163
Топерверг Борис Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	boris@ill.fr	
Трофимова Наталия	ОАО "НИИГрафит"	natmoiseeva@gmail.com	
Тукмакова Надежда Алексеевна	КФУ	NadejdaTukmakova@yandex.ru	126
Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	turchenko@jinr.ru	155
Тюлюсов Антон Николаевич	ГНЦ РФ ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	

Уклеев Виктор Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	73
Упоров Сергей Александрович	Имет УрО РАН	segga@bk.ru	127
Устинов Владимир Васильевич	ИФМ УрО РАН	ustinov@imp.uran.ru	8
Утесов Олег Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	utiosov@gmail.com	181
Федоров Владимир Викторович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	vfedorov@fl.ioffe.ru	93
Формозов Андрей Алексеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	formozoff@gmail.com	
Фрей Дмитрий Ильич	МФТИ	dima.frey@gmail.com	94
Хайдуков Юрий Николаевич	MPI for Solid State Research	y.khaydukov@fkf.mpg.de	
Хамова Тамара Владимировна	ИХС РАН	LTPP@rambler.ru	95
Хейфец Борис	НИТУ МИСиС	kheyfboris@gmail.com	
Царьков Максим Владимирович	БФУ им. И. Канта	max.offreal@gmail.com	
Цыпильников Андрей Васильевич	СПбГУ	grifft92@gmail.com	
Черненко Юрий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	yucher@pnpi.spb.ru	
Чернышов Дмитрий Юрьевич	ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	
Чубова Надежда Михайловна	ПИЯФ НИЦ КИ	potapova@lns.pnpi.spb.ru	74,75
Чувашова Ирина Геннадьевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	irina.chuvashova@gmail.com	128
Чумаков Андрей	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakov@lns.pnpi.spb.ru	26,76, 129
Чумакова Александра	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakova@lns.pnpi.spb.ru	96,129
Шапилов Александр Владимирович	БФУ им. И. Канта	shapilloff@gmail.com	
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	mischar@mail.ioffe.ru	97

Шахов Федор Михайлович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	fedor.shakhov@mail.ioffe.ru	130
Шеврев Станислав Геннадиевич	ОИЯИ	fontorque@mail.ru	
Шестаков Александр Евгеньевич	РФЯЦ-ВНИИТФ	a.e.shestakov@list.ru	182
Шишкин Иван Сергеевич	СПбГУ	shishkin-ivan@list.ru	131
Шурыгина Виктория Александровна	СамГТУ	Shuryginanf@yandex.ru	
Юркевич Оксана Витальевна	БФУ им. И. Канта	oyurkevich@innopark.kantiana.ru	98
Якунина Елена Михайловна	ИФМ УрО РАН	eyakuninaart@gmail.com	16
Яресько Александр	MPI for Solid State Research	a.yaresko@fkf.mpg.de	
Яшина Екатерина Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	yashina_91@inbox.ru	77