

XIV ICMISA

XIV International Conference

# Mössbauer Spectroscopy and Applications

28 September - 1 October, 2016  
Kazan

Book of Abstracts and Program



**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ  
И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ**

**Сборник материалов  
XIV Международной конференции**



**Казань, 28 сентября – 1 октября 2016 г.**



**КАЗАНЬ  
2016**

**УДК 53:0 - 75065- 765064; 05**

**ББК 22.344**

**M99**

**Составители:**

**Е.В. Воронина,**

**Е.Н. Дулов,**

**А.В. Пятаев,**

**А.Г. Иванова**

**M99** **Мёссбауэровская спектроскопия и ее применения:** сборник материалов XIV Международной конференции (Казань, 28 сентября – 1 октября 2016 г.) – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2016. – 204 с.

**ISBN 978-00019-696-0**

Сборник включает в себя программу и тезисы докладов участников XIV Международной конференции «Мёссбауэровская спектроскопия и ее применения», проводившейся в г. Казань 28 сентября – 1 октября 2016 г.

**УДК 53:0 - 75065- 765064; 05**

**ББК 22.344**

**ISBN 978-00019-696-0**

© Издательство Казанского университета, 2016

## **ОРГАНИЗАТОРЫ И ПАРТНЕРЫ**

**Казанский федеральный университет**

**Российская Академия Наук**

**Совет РАН “Общая химия и наука о материалах”**

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова  
Российской Академии Наук**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования “Московский  
технологический университет”**

**Научно-исследовательский институт ядерной физики  
им. Д. В. Скобельцына МГУ им. М. В. Ломоносова**

**Российский Фонд Фундаментальных Исследований**

Конференция поддержана РФФИ: грант № 16-02-20658-г

**ЗАО «РИТВЕРЦ»**

**ООО «КРИОТРЕЙД»**

## ORGANIZING COMMITTEE

<b>Chairman</b>	Sigov Aleksandr Sergeevich, Academician, Moscow
<b>Co-Chairman</b>	Burkhanov Gennady Sergeevich, corresponding member of RAS, Moscow
<b>Vice-Chairman</b>	<u>Godovikov Sergei Konstantinovich</u> , Moscow

## Committee Members

Arzhnikov A.K., Izhevsk	Prosvirnin D.V., Moscow
Barinov S.M., Corresponding member of RAS, Moscow	Rusakov V.S., Moscow
Chuev M.A., Moscow	Sadykov E.K., Kazan
Chumakov A.I., Grenoble, France	Savchenko A.G. Moscow
Grigorovich K.V., Corresponding member of RAS, Moscow	Sagaradze V.V., corresponding member of RAS, Ekaterinburg
Kadyrzhanov K.K., Kazakhstan	Sarychev D.A., Rostov-on-Don
Kamnev A.A., Saratov	Semenkin V.A., Ekaterinburg
Kolmakov A.G., Moscow	Semenov V.G., St. Petersburg
Mašlan M., Czech Republic	Shabashov V.A., Ekaterinburg
Miglierini M., Slovakia	Tagirov L.R., Kazan
Nagy D.L., Hungary	Voronina E.V., Kazan
Perfiliev Yu.D., Moscow	<u>Yelsukov E.P.</u> , Izhevsk
Pokatilov V.S. Moscow	

## Program Committee

**Chairman:** Shabashov V.A., Ekaterinburg

## Committee Members

Sagaradze V.V., Ekaterinburg	Rusakov V.S., Moscow
Chuev M.A., Moscow	Voronina E.V., Kazan

## Local Committee

**Chairman:** Voronina E.V., Kazan

## Committee Members

Prosvirnin D.V., Moscow	Pyataev A.V., Kazan
Dulov E.N., Kazan	Ivanova A.G., Kazan
Boltakova N.V., Kazan	

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

<b>Председатель Оргкомитета</b>	Сигов Александр Сергеевич, академик РАН, Москва
<b>Сопредседатель Оргкомитета</b>	Бурханов Геннадий Сергеевич, чл.-корр. РАН, Москва
<b>Заместитель председателя</b>	<u>Годовиков Сергей Константинович</u> , Москва

### Члены Оргкомитета

Аржников А.К., Ижевск	Просвирнин Д.В., Москва
Баринов С.М., чл.-корр. РАН, Москва	Русаков В.С., Москва
Воронина Е.В., Казань	Савченко А.Г., Москва
Григорович К.В., чл.-корр. РАН, Москва	Сагарадзе В.В., чл.-корр. РАН, Екатеринбург
<u>Елсуков Е.П.</u> , Ижевск	Садыков Э.К., Казань
Кадыржанов К.К., Казахстан	Сарычев Д.А., Ростов-на-Дону
Камнев А.А., Саратов	Семёнкин В.А., Екатеринбург
Колмаков А.Г., Москва	Семенов В.Г., С.-Петербург
Mašlan M., Czech Republic	Тагиров Л.Р., Казань
Miglierini M., Slovakia	Чуев М.А., Москва
Nagy D.L., Hungary	Чумаков А.И., Москва
Перфильев Ю.Д., Москва	Шабашов В.А., Екатеринбург
Покатилов В.С., Москва	

### Программный комитет конференции

**Председатель:** Шабашов В.А., Екатеринбург

#### Члены программного комитета

Сагарадзе В.В., Екатеринбург	Русаков В.С., Москва
Чуев М.А., Москва	Воронина Е.В., Казань

### Локальный комитет конференции

**Председатель:** Воронина Елена Валентиновна, Казань

#### Члены локального комитета

Просвирнин Д.В., Москва	Пятаев А.В., Казань
Дулов Е.Н., Казань	Иванова А.Г., Казань
Болтакова Н.В., Казань	

# ПРОГРАММА

# PROGRAM

---

Вторник, 27 сентября  
Tuesday, September 27, 2016

День заезда и регистрации участников  
The day of arrival and registration of the  
Conference participants

Среда, 28 сентября, 2016  
Wednesday, September 28, 2016

9.00

Открытие  
Opening

*Секция I. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме*  
*Председатель – Шабашов В.А., Садыков Э.К.*  
*Topic I. Hyperfine interactions in the solid state physics and magnetism*  
*Chair – Shabashov V.A., Sadykov E.K.*

9.15 I I-1

Чуев М.А. Спектр возбуждений и магнитная динамика неелевского ансамбля антиферромагнитных наночастиц в мёссбауэровской спектроскопии

Chuev M.A. Excitation spectrum and magnetic dynamics of the Néel's ensemble of antiferromagnetic nanoparticles in Mössbauer spectroscopy

9.45 I I-2

Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Мацнев М.Е., Гапочка А.М., Глазкова Я.С. Пространственная спин-модулированная структура и сверхтонкие взаимодействия ядер  $^{57}\text{Fe}$  в мультиферроиках  $\text{BiFeO}_3$  и  $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$  ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ )

Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A., Matsnev M.E., Gapochka A.M., Glazkova Ia.S. Spatial spin-modulated structure and hyperfine interactions of  $^{57}\text{Fe}$  nuclei in  $\text{BiFeO}_3$  and  $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$  ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ ) multiferroics

10.15 O I-3

Seidov Z., Krug von Nidda H.-A., Tsurkan V., Filipova I., Günther A., Aliyev M., Vagizov F., Kiiamov A., Tagirov L., Gavrilova T., Loidl A. Magnetic properties of the chain antiferromagnet  $\text{RbFeSe}_2$

## 10.30 O I-4

Седых В.Д. Аномальные особенности структурных превращений в слабо легированном барием манганите лантана и их корреляция с физическими свойствами

Sedykh V.D. Anomalous features of structure transformations in Ba-doped lanthanum manganites and their correlation with physical properties

## 10.45 O I-5

Троян И.А., Гаврилюк А.Г., Ruffer R., Чумаков А.И., Любутин И.С. Наблюдение сверхпроводимости в сероводороде с помощью эффекта Мёссбауэра при высоких давлениях

Troyan I.A., Gavriliuk A.G., Ruffer R., Chumakov A., Lyubutin I.S. Observation of superconductivity in hydrogen sulfide by the Mössbauer effect at high pressures

## 11.00 O I-6

Lindén Johan K. M., Karen P., Lindroos F.J. Valence mixing and charge ordering in the  $R\text{BaFe}_2\text{O}_5$  double perovskite ( $R=\text{Y, Gd, Tb or Ho}$ )

## 11.15

### Кофе-брейк Coffee-break

## 11.35 I I-7

Покатилов В.С., Сигов А.С., Китаев В.В. Исследование аморфных сплавов  $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x = 0 - 20$ ) методом ЯМР на ядрах  $^{11}\text{B}$  и эффекта Мёссбауэра на ядрах  $^{57}\text{Fe}$

Pokatilov V.S., Sigov A.S., Kitaev V.V.  $^{11}\text{B}$  NMR and  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer study of amorphous  $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x=0-20$ ) alloys

## 12.05 O I-8

Покатилов В.С., Русаков В.С., Сигов А.С. Особенности ЯМР спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в мультиферроике  $\text{BiFeO}_3$

Pokatilov V.S., Rusakov V.S., Sigov A.S. Features of  $^{57}\text{Fe}$  NMR spectroscopy in the multiferroic  $\text{BiFeO}_3$

## 12.20 O I-9

Gainov R.R., Golovanevskiy V.A., Vagizov F.G., Khassanov R.R., Douglav A.V.I, Nemkovskii K., Prokes K., Yokaichiya F., Russina M. Zero-field NMR, Mössbauer effect and neutron diffraction in  $\text{CuFeS}_2$

## 12.35 O I-10

Фролов К.В., Любутин И.С., Смирнова Е.С., Алексеева О.А., Верин И.А., Безматерных Л.Н., Гудим И.А. Низкотемпературные мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования ферроборатов  $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $R = \text{Y, Nd, Sm, Gd}$ )

Frolov K.V., Lyubutin I.S., Smirnova E.S., Alekseeva O.A., Verin I.A., Bezmaternykh L.N., Gudim I.A. Low temperature Mössbauer and X-ray structural studies of the ferrobates  $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $R = \text{Y, Nd, Sm, Gd}$ )



## 12.50 O I-11

Мищенко И.Н., Чуев М.А., Черепанов В.М., Поликарпов М.А. Квантовая модель магнитной динамики однодоменных частиц для описания их кривых намагничивания и мёссбауэровских спектров в слабом магнитном поле

Mischenko I.N., Chuev M.A., Cherepanov V.M., Polikarpov M.A. Quantum model of single-domain particles' magnetic dynamics for description of their magnetization curves and Mössbauer spectra in a weak magnetic field

## 13.05 O I-12

Клейнерман Н.М., Сериков В.В., Власова Н.И., Попов А.Г. Исследование особенностей формирования структуры упорядочивающегося сплава FePd

Kleinerman N.M., Serikov V.V., Vlasova N.I., Popov A.G. Study of peculiarities of structure formation in FePd ordered alloy

## 13.20 O I-13

Dobysheva L.V. First-principles calculations of alloyed cementite (Fe-Ni)<sub>3</sub>C

## 13.35

### Обед Lunch-time

*Секция I. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме  
(продолжение)*

*Председатель – Любутин И.С.*

*Topic I. Hyperfine interactions in the Solid state physics and magnetism*

*Chair – Lyubutin I.S.*

## 15.00 I I-14

Чумаков А.И. Обзор работ по ядерному резонансному рассеянию на ESRF

Chumakov A.I. Review of nuclear resonance scattering studies at the ESRF

## 15.30 I I-15

Соболев А.В., Русаков В.С., Гапочка А.В., Глазкова Я.С., Мацнев М.В., Панкратов Д.А., Пресняков И.А. Мёссбауэровское исследование модулированной магнитной структуры FeVO<sub>4</sub>

Sobolev A.V., Rusakov V.S., Gapochka A.V., Glazkova Y.S., Matsnev M.V., Pankratov D.A., Presniakov I.A. Mössbauer investigation of modulated magnetic structure of FeVO<sub>4</sub>

## 16.00 O I-16

Глазкова Я.С., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А. Мёссбауэровское исследование структурных модуляций в манганитах AMn<sub>7</sub>O<sub>12</sub> (A = Ca, Sr, Cd, Pb)

Glazkova Y.S., Belik A.A., Sobolev A.V., Presniakov I.A. Mössbauer investigation of structural modulations in AMn<sub>7</sub>O<sub>12</sub> (A = Ca, Sr, Cd, Pb) manganites

## 16.15 O I-17

*Ovanesyan N.S., Nikitina Z.K., Shilov G.V., Makhaev V.D., Li Ya.* Localized and itinerant electron ferromagnetism in two-dimensional organo-metallic networks

## 16.30 O I-18

*Степанов С.В., Бяков В.М., Перфильев Ю.Д., Куликов Л.А.* Локальный нагрев среды в нанокрестности ядра  $^{57}\text{Co}$ , превратившегося в ядро  $^{57}\text{Fe}$  в результате процесса E-захвата

*Stepanov S.V., Byakov V.M., Perfiliev Yu.D., Kulikov L.A.* Local heating in the nanovicinity of the  $^{57}\text{Co}$  nucleus, transformed into  $^{57}\text{Fe}$  as a result of the E-capture

## 16.45 I I-19

*Бурханов Г.С.* Возможности применения Мёссбауэровской спектроскопии в материаловедческих исследованиях

*Burkhanov G.S.* Possibilities of application of Mössbauer spectroscopy in materials science research

17.15

**Кофе-брейк  
Coffee-break**

**Стендовая сессия. Секции I - VIII  
Poster session. Topics I - VIII**

19.30

**Ужин  
Dinner**

**Заседание Организационного комитета  
конференции**

20.30

**The Organizing Committee meeting**

**Четверг, 29 сентября, 2016**

**Thursday, September 29, 2016**

*Секция III. Перспективные материалы и современные технологии их получения*

*Председатель – Русаков В.С., Андреева М.А.*

*Topic III. Advanced materials and modern technologies*

*Chair – Rusakov V.S., Andreeva M.A.*

## 9.00 I III-1

*Lyubutin I.S., Starchikov S.S., Gavriiliuk A.G., Troyan I.A., Nikiforova Yu.A., Naumov P.G., Struzhkin V.V., Chumakov A.I., and Ruffer R.* High-pressure magnetic and structural transitions in the iron containing langasite multiferroics observed by synchrotron Mössbauer and XRD methods

## 9.30 I III-2

*Шабашов В.А.* Мёссбауэровское исследование атомного перераспределения в специально легированных Fe-Ni сплавах при интенсивных деформационных и радиационных воздействиях

Shabashov V.A. Mössbauer study of atomic redistribution in Fe-Ni alloys during intense deformation and radiation effects

### 10.00 O III-3

Dorofeev G.A., Lubnin A.N., Ulyanov A.L., Mukhgalin V.V. Accelerated mechanosynthesis of high-nitrogen stainless steel: Mössbauer and X-ray diffraction studies

### 10.15 O III-4

Kozlov K.A., Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Piliugin V.P., Lyashkov K.A., Zamatovskiy A.E. Деформационно-ускоренное атомное перераспределение в ОЦК Fe-Mn сплавах

Kozlov K.A., Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Piliugin V.P., Lyashkov K.A., Zamatovsky A.E. Deformation-accelerated atomic redistribution in BCC Fe-Mn alloys

### 10.30 O III-5

Баринов В.А., Протасов А.В., Суриков В.Т. Исследование механосинтезированного  $\chi$ -карбида Хегга

Barinov V.A., Protasov A.V., Surikov T.S. Studying mechanosynthesized Hägg carbide ( $\chi$ -Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>)

### 10.45 O III-6

Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Порсев В.Е., Колодкин Д.А., Загайнов А.В., Немцова О.М.

Мёссбауэровские исследования механического сплавления высококонцентрированных сплавов Fe-Cr

Yelsukov E.P., Ulyanov A.L., Porsev V.E., Kolodkin D.A., Zagainov A.V., Nemtsova O.M. Mössbauer study of mechanical alloying of highly concentrated Fe-Cr alloys

### 11.00 O III-7

Ярославцев С.А., Востров Н.И., Скундин А.М., Кулова Т.Л., Ярославцев А.Б., Русаков В.С. Локальные состояния атомов железа и сверхтонкие взаимодействия ядер <sup>57</sup>Fe в

Li<sub>x</sub>Fe<sub>1-y</sub>M<sub>y</sub>PO<sub>4</sub> (M = Mn, Co, Ni, Mg)

Yaroslavtsev S.A., Vostrov N.I., Skundin A.M., Kulova T.L., Yaroslavtsev A.B., Rusakov V.S. Local states of iron atoms and hyperfine interactions of <sup>57</sup>Fe nuclei in Li<sub>x</sub>Fe<sub>1-y</sub>M<sub>y</sub>PO<sub>4</sub> (M = Mn, Co, Ni, Mg)

### 11.15

### Кофе-брейк Coffee-break

### 11.35 I III-8

Bajnóczi É.G., Bogdán Cs., Deák L., Nagy D.L., Németh Z., Pápai M., Vankó G. Optimizing Fe<sup>2+</sup> molecular switches by Mössbauer spectroscopy

### 12.05 O III-9

Перфильев Ю.Д., Чернавский П.А., Панкина Г.В. Изучение промотированных медью и калием Fe-нанесенных катализаторов методом мессбауэровской спектроскопии

Perfiliev Yu.D., Chernavskii P.A., Pankina G.V. Study of promoted by Cu and K iron-based catalysts by means of Mössbauer spectroscopy

## 12.20 O III-10

Ульянов А.Л., Ульянов А.И., Чулкина А.А., Елсуков Е.П. Формирование легированного Ni цементита в процессе механохимического синтеза и последующих отжигов

Ulyanov A.L., Ulyanov A.I., Chulkina A.A., Yelsukov E.P. Formation of the Ni-doped cementite under mechanochemical synthesis and subsequent annealing

## 12.35 O III-11

Шаненков И.И., Сивков А.А., Ивашутенко А.С. Плазмодинамический синтез ультрадисперсных магнитомягких материалов в системе «железо-кислород»

Shanenkov I.I., Sivkov A.A., Ivashutenko A.S. Plasmadynamic synthesis of ultradispersed soft magnetic materials in the system “iron-oxygen”

12.50

**Обед  
Lunch-time**

**Культурная программа (экскурсии)**

**Ужин (по возвращению с экскурсий)  
Dinner (upon return from trips)**

**Пятница, 30 сентября, 2016  
Friday, September 30, 2016**

*Секция II. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры  
Председатель – Чуев М.А.  
Topic II. Surface, thin films and nanosystems  
Chair – Chuev M.A.*

## 9.00 I II-1

Lančok A. Mössbauer spectroscopy of iron-containing nanoparticles in different types of materials

## 9.30 I II-2

Popov V.V., Sergeev A.V., Stolbovsky A.V. Mössbauer spectroscopy of grain boundaries in ultrafine-grained materials processed by severe plastic deformation

## 10.00 O II-3

Литвинов А.В., Шабашов В.А., Завалишин В.А., Афанасьев С.В., Коришунов Л.Г., Катаева Н.В. Структурно-фазовые переходы при мегапластической деформации азотированной нержавеющей стали

Litvinov A.V., Shabashov V.A., Zavalishin V.A., Afanas'ev S.V., Korshunov L.G., Kataeva N.V. Structural-phase transitions during megaplastic deformation of nitrided stainless steel

## 10.15 O II-4

Черепанов В.М., Габбасов Р.Р., Мищенко И.Н., Поликарпов М.А., Чуев М.А., Юрени А.Ю.,

## Мёссбауэровская спектроскопия и её применения XIV

---

*Панченко В.Я.* Синтез и мёссбауэровское исследование наночастиц магнетита в водных коллоидах, предназначенных для струйной печати

*Cherepanov V.M., Gabbasov R.R., Mischenko I.N., Polikarpov M.A., Chuev M.A., Yurenya A.Y., Panchenko V.Y.* Synthesis and Mössbauer study of magnetite nanoparticles in water colloids intended for jet printing

### 10.30 О II-5

*Starchikov S.S., Gervits N.E., Lin C.-R., Dmitrieva T.V., Lyubutin I.S.* Structural, magnetic and electronic properties of  $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$  nanoparticles studied by Mössbauer and Raman spectroscopy

### 10.45 О II-6

*Валиуллин А.А., Камзин А.С., Тагиров Л.Р.* Исследования магнитных пленок для сверхвысокоплотной записи информации

*Valiullin A.A., Kamzin A.S., Tagirov L.R.* Research of properties of magnetic thin films for recorders and storage devices

### 11.00 О II-7

*Залуцкий А.А., Седьмов Н.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.* Исследование динамических и фазовых переходов в системе «железо-пленки воды-поверхность наноглин»

*Zalutskii A.A., Sed'mov N.A., Shkolnikov E.N., Morozov V.V.* The study of dynamic and phase transitions in the «iron-water film-surface nanoclays»

### 11.15 О II-8

*Перунов И.В., Фролов К.В., Коротков В.В., Бедин С.А., Загорский Д.Л., Любутин И.С., Хмеленин Д.Н., Артёмов В.В., Сульянов С.Н., Чуев М.А.* Фазовый состав и магнитные свойства Fe-Co и Fe-Ni нанопроволок, полученных в порах трековых мембран

*Perunov I.V., Frolov K.V., Korotkov V.V., Bedin S.A., Zagorsky D.L., Lyubutin I.S., Khmelinin D.N., Artemov V.V., Sulyanov S.N., Chuev M.A.* Phase composition and magnetic properties of Fe-Co and Fe-Ni nanowires, obtained in pores of the track-etched membranes

### 11.30 О II-9

*Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Козловский А.Л., Киселева Т.Ю., Здоровец М.В., Фадеев М.С., Лукьянова Е.Н.* Исследование Fe и Fe-Co нанотрубок в полимерных ионно-трековых мембранах

*Rusakov V.S., Kadyrzhanov K.K., Kozlovskiy A.L., Kiseleva T.Yu., Zdorovets M.V., Fadeev M.C., Luk'yanova E.N.* Study of Fe and Fe-Co nanotubes in polymer ion-track membranes

### 11.45

### Кофе-брейк Coffee-break

*Секция IV. Биологические и медицинские применения*

*Председатель – Надь Д.Л.*

*Topic IV. Biological and medical applications*

*Chair – Nagy Dénes Lajos*

## 12.05 I IV-1

Камнев А.А., Тугарова А.В., Куликов Л.А., Перфильев Ю.Д. Связывание катионов  $^{57}\text{Co}^{2+}$  в активных центрах ферментов: возможности эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии в энзимологии

Kamnev A.A., Tugarova A.V., Kulikov L.A., Perfiliev Yu.D. Binding of  $^{57}\text{Co}^{2+}$  cations in enzyme active centers: potentials of emission Mössbauer spectroscopy in enzymology

## 12.35 O IV-2

Kamzin A.S. Magnetic nanoparticles for “theranostic” biomedical applications

## 12.50 O IV-3

Бяков В.М., Перфильев Ю.Д., Куликов Л.А., Степанов С.В. О возможности использования эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии для выявления химических канцерогенов

Vyakov V.M., Perfiliev Yu. D., Kulikov L.A., Stepanov S.V. Emission Mössbauer spectroscopy and testing for potential chemical carcinogens

## 13.05 O IV-4

Перфильев Ю.Д., Коннычев М.А., Тамбиев А.Х. Мёссбауэровское изучение цианобактерий *Spirulina platensis*

Perfiliev Yu.D., Konnychev M.A., Tambiev A.Kh. Mössbauer study of cyanobacterium *Spirulina platensis*

## 13.20

### Обед Lunch-time

*Секция VI. Синхротронное излучение и гамма-оптика*

*Председатель – Чумаков А.И.*

*Topic VI. Synchrotron radiation and gamma optics*

*Chair – Chumakov A.I.*

## 14.50 I VI-1

Andreeva M.A., Baulin R.A., Chumakov A.I., Smirnov G.V., Rüffer R., Babanov Yu.A., Devyaterikov D.I., Goloborodsky B.Yu., Ponomarev D.A., Romashev L.N., Ustinov V.V. Mössbauer reflectivity investigations of  $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$  multilayers using synchrotron Mössbauer source

## 15.20 I VI-2

Вагизов Ф.Г., Шахмуратов Р.Н. Новые приложения эффекта Мёссбауэра

Vagizov F.G., Shakhmurov R.N. New applications of the Mössbauer effect

## 15.50 I VI-3

Садыков Э.К., Юричук А.А., Вагизов Ф.Г., Мубаракишин Ш.И. Мёссбауэровское рассеяние вперед в поле звука: альтернативные схемы эксперимента

*Sadykov E.K., Yurichuk A.A., Vagizov F.G., Mubarakshin Sh.I.* Mössbauer forward scattering under acoustical excitation: alternative schemes of experiment

### 16.20 O VI-4

*Nikiforova Yu.A., Lyubutin I.S., Gavriiliuk A.G., Starchikov S.S., Sulyanov S.N., Ivanova A.G., Troyan I.A., Aksenov S.N.* High pressure study of langasites  $\text{Ba}_3\text{MFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  ( $M = \text{Ta}$  and  $\text{Nb}$ ) by XRD, Mössbauer and Raman spectroscopy

### 16.35

### Кофе-брейк Coffee-break

*Секция VII. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие*  
*Председатель – Ланчок А.*  
*Topic VII. Mineralogy geosciences, ecology and a cultural heritage*  
*Chair – Lančok A.*

### 17.00 I VII-1

*Чистякова Н.И., Шапкин А.А., Антонова А.В. Медвецкая И.Ю. Пчелина Д.И. Грачева М.А., Киселева Т.Ю. Жилина Т.Н., Гаврилов С.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.* Биогенные преобразования железосодержащих минералов в щелочных условиях

*Chistyakova N.I., Shapkin A.A., Antonova A.V., Medvetskaya I.Yu., Pchelina D.I., Gracheva M.A., Kiseleva T.Yu., Zavarzina D.G., Zhilina T.N., Gavrilov S.N., Rusakov V.S.* Biogenic transformation of iron-containing minerals in alkaline conditions

### 17.30 O VII-2

*Maksimova A.A., Chukin A.V., Semionkin V.A., Oshtrakh M.I.* The  $\text{Fe}^{2+}$  Occupancies in the silicates M1 and M2 Sites in Chelyabinsk LL5 meteorite determined using XRD and Mössbauer spectroscopy

### 17.45 O VII-3

*Феклистов Д.Ю., Филиппов В.П., Курчатов И.М., Лагунцов Н.И., Саломасов В.А., Пермяков Ю.В., Оштрах М.И.* Мёссбауэровские исследования состояния железа в алюмосиликатном реагенте для очистки воды

*Feklistov D.Yu., Filippov V.P., Kurchatov I.M., Laguntsov N.I., Salomasov V.A., Permyakov Yu.V., Oshtrakh M.I.* Mössbauer investigation of iron state in aluminosilicate reagent for water treatment

### 18.00 O VII-4

*Gainov R.R., Khassanov R.R., Vagizov F.G., Golovanevskiy V.A., Pen'kov I.N.* Application of X-ray computed tomography, NQR and Mössbauer in studies of fossil wood

### 18.15

### Заседание Организационного комитета конференции The Organizing Committee meeting

19.00

Товарищеский ужин  
Conference dinner

Суббота, 1 октября, 2016

Saturday, October 1, 2016

*Секция V. Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь*

*Председатель – Пресняков И.А.*

*Topic V. Chemistry, petroleochemistry, catalysis, structure and chemical bond*

*Chair – Presnyakov I.A.*

**9.30 O V-1**

*Афанасов М.И., Короленко М.В., Фабричный П.Б., Ружье А., Лабрюжер К.* Мёссбауэровская спектроскопия зондовых катионов  $^{119}\text{Sn}$  на поверхности кристаллитов ZnO: электронное состояние, локальное окружение и химические реакции примесных добавок олова

*Afanasov M.I., Korolenko M.V., Fabritchnyi P.B., Rougier A., Labrugère C.* Mössbauer spectroscopy of  $^{119}\text{Sn}$  probe cations located on the surface of ZnO crystallites: electronic state, local surrounding and chemical reactions of tin dopant

**9.45 O V-2**

*Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д.* О некоторых аспектах идентификации степени окисления железа по мёссбауэровским изомерным сдвигам

*Dedushenko S.K., Perfiliev Yu.D.* On the identification of iron oxidation state by Moessbauer isomer shifts

**10.00 O V-3**

*Перфильев Ю.Д., Балдохин Ю.В., Куликов Л.А.* Изотопный эффект при восстановлении оксида железа водородом

*Perfiliev Yu.D., Baldokhin Yu.V., Kulikov L.A.* Isotope effect for iron oxide reduction by hydrogen

**10.15 O V-4**

*Похолок К.В., Филимонов Д.С., Розова М.Г., Тябликов О.А.* Zn-замещенные ферриты стронция со структурой типа браунмиллерита

*Pokholok K.V., Filimonov D.S., Rozova M.G., Tyablikov O.A.* Zn-substituted strontium iron brownmillerites

**10.30 O V-5**

*Короленко М.В., Фабричный П.Б., Афанасов М.И., Асташкин Р.А.* Применение Мёссбауэровской спектроскопии  $^{121}\text{Sb}$  для разграничения влияния добавок хрома и сурьмы на фотокаталитические свойства порошков анатазной модификации  $\text{TiO}_2$

*Korolenko M.V., Fabritchnyi P.B., Afanasov M.I., Astashkin R.A.* Application of  $^{121}\text{Sb}$  Mössbauer spectroscopy to discrimination of the effects of Cr and Sb co-dopants on the photocatalytic properties of anatase-type polycrystalline  $\text{TiO}_2$



## 10.45 O V-6

Ерёмина М.А., Ломаева С.Ф., Ульянов А.Л., Елсуков Е.П. Мёссбауэровская спектроскопия структурно-фазовых превращений при механосплавлении меди и железа в жидкой среде

Eremina M.A., Lomaeva S.F., Ulyanov A.L., Yelsukov E.P. Mössbauer spectroscopy of structural and phase transformations during copper and iron mechanical alloying in liquid medium

## 11.00 O V-7

Пилягин М.В., Вахитов И.Р., Дулов Е.Н., Тагиров Л.Р. Безокислительная термообработка металлов в воздушной среде

Pilyagin M.V., Vakhitov I.R., Dulov E.N., Tagirov L.R. Nonoxidation annealing of metals in an air atmosphere

## 11.15

### Кофе-брейк Coffee-break

*Секция VIII. Техника эксперимента и методология*

*Председатель – Семенов В.Г.*

*Topic VIII. New experimental methods and techniques*

*Chair – Semenov V.G.*

## 11.50 O VIII-1

Shakhmurov R.N., Vagizov F.G. New model for acoustically induced Mössbauer sidebands from a single parent line

## 12.05 O VIII-2

Ромашкина И.Л., Козин М.Г., Кошелец В.П., Филиппенко Л.В. Регистрация спектра излучения мёссбауэровского источника  $^{119m}\text{Sn}$  сверхпроводящими туннельными детекторами

Romashkina I.L., Kozin M.G., Koshelets V.P., Filippenko L.V. Registration of the radiation from Mössbauer  $^{119m}\text{Sn}$  source with superconducting tunnel junction detectors

## 12.20 O VIII-3

Козин М.Г., Ромашкина И.Л. Электронная мёссбауэровская спектроскопия

Kozin M.G., Romashkina I.L. Electron Mössbauer spectroscopy

## 12.35 O VIII-4

Левин Д.М., Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д. Компьютерная программа для групповой обработки мёссбауэровских спектров «Happy Sloth»

Levin D.M., Dedushenko S.K. and Perfiliev Yu.D. Happy Sloth PC program for the collective fitting of Moessbauer spectra

## 12.50 O VIII-5

Боков А.В., Перфильев Ю.Д., Филиппов В.П., Чуев М.А. Метод корректного учёта толщины поглотителя при обработке мёссбауэровских спектров в программе DISCOVER

Vokov A.V., Perfiliev Yu.D., Filippov V.P., Chuev M.A. Method of the correct account for the absorber thickness when processing Mössbauer spectra in the program DISCOVER

## **13.05 O VIII-6**

*Oshtrakh M.I., Semionkin V.A.* Application of Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution: principles, problems and advances

**13.50**

**Заккрытие конференции  
Closing session**

## Стендовые доклады Poster contributions

*Секция I. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме*

*Председатель – Покатилов В.С., Фролов К.В.*

*Topic I. Hyperfine interactions in the Solid state physics and magnetism*

*Chair – Pokatilov V.S., Frolov K.V.*

### **P I-1**

*Singh C., Zaki H. M., Abdel-Latif I. A., Singh J., Bindra Narang S., Joshi R.* Structural, magnetic properties and Mössbauer spectra of  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_x\text{Al}_x\text{Fe}_{12-2x}\text{O}_{19}$  ( $x=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  and 1)

### **P I-2**

*Акуленко А.А., Соболев А.В., Панкратов Д.А., Глазкова Я.С., Пресняков И.А.* Мёссбауэровское исследование локальных кристаллографической и магнитной структур оксофосфата железа (III)  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$

*Akulenko A.A., Sobolev A.V., Pankratov D.A., Glazkova I.S., Presniakov I.A.* Mössbauer study of the local crystallographic and magnetic structures of iron (III) oxophosphate  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$

### **P I-3**

*Балуян Т.Г., Новакова А.А.* Исследование магнитных фазовых превращений в частицах селенида железа, полученных методом высокотемпературной твердофазной реакции

*Baluyan T.G., Novakova A.A.* Investigation of magnetic phase transition in the solid state reaction-obtained iron selenide particles

### **P I-4**

*Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Мацнев М.Е., Гапочка А.М., Кулаков К.В., Лукьянова Е.Н.* Температурные исследования мультиферроика  $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$  методами мёссбауэровской спектроскопии

*Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A., Matsnev M.E., Gapochka A.M., Kulakov K.V., Luk'yanova E.N.* Temperature study of  $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$  multiferroic by Mössbauer spectroscopy methods

### **P I-5**

Годовиков С.К. Парамагнитная магнитострикция в тербии

Godovikov S.K. Magnetostriction of Tb in paramagnetic state

### **P I-6**

*Kiseleva T.Yu., Kabanov V.M., Zholudev S.I., Novakova A.A., Markov G.P.* Mössbauer study of polymer composites with spatially oriented ferromagnetic particles of different composition and shape

### **P I-7**

*Kiiamov A.G., Vagizov F.G., Tagirov L.R., Lysogorskiy Y.V., Tsurkan V., Loidl A., Taurskii D. A.* Low temperature Mössbauer study of  $\text{Fe}_{1.05}\text{Te}$

## **P I-8**

Knyazev Yu.V., Kazak N.V., Bayukov O.A., Bezmaternyh L.N., Solovyov L.A., Platonov M.S., Ovchinnikov S.G. Study of cation distribution in single crystals  $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{BO}_4$  ( $x = 0.34, 0.53, 0.72$ ) through Mössbauer spectroscopy

## **P I-9**

Lysogorskiy Y.V., Krivenko S.A., Nedopekin O.V. and Tayurskii D.A. Ab-initio study of electronic correlations and disproportionation in the  $x=2/3$  phase of sodium cobaltates

## **P I-10**

Кириченко В.Г. Мёссбауэровская спектроскопия включений интерметаллидов в циркониевых сплавах

Kirichenko V.G. Mössbauer spectroscopy of intermetallic phases inclusions in zirconium alloys

## **P I-11**

Kirichenko V.G., Kovalenko O.V. Structure of surface nanolayers of yttrium iron garnet films

## **P I-12**

Лекина Ю.О., Глазкова Я.С., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А. Исследование локальной структуры  $\text{BiNiO}_3$  методом зондовой мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$

Lekina Yu., Glazkova Ia., Belik A., Sobolev A., Presniakov I. Investigation of bismuth nickelate  $\text{BiNiO}_3$  local structure by  $^{57}\text{Fe}$  probe Mössbauer spectroscopy

## **P I-13**

Лекина Ю.О., Глазкова Я.С., Вей И., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А. Исследование хромитов  $R\text{CrO}_3$  ( $R = \text{Tl}, \text{Bi}$ ) со структурой перовскита методом зондовой мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$

Lekina Yu., Glazkova Ia., Wei Yi, Belik A., Sobolev A., Presniakov I.  $^{57}\text{Fe}$  probe Mössbauer investigation of  $R\text{CrO}_3$  ( $R = \text{Tl}, \text{Bi}$ ) perovskites

## **P I-14**

Макарова А.О., Покатилов В.С., Сигов А.С., Китаев В.В. Локальные структурные состояния примесных атомов железа в перовскитах  $\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0 - 0.50$ )

Makarova A.O., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Kitaev V.V. Local structural states of Fe – impurity atoms in the perovskites  $\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0 - 0.50$ )

## **P I-15**

Наумов С.П., Вершинин А.В., Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В. Мёссбауэровское исследование магнитного фазового перехода в соединении  $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$

Naumov S.P., Vershinin A.V., Serikov V.V., Kleinerman N.M., Mushnikov N.V. Mössbauer study of magnetic phase transition in  $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$

## **P I-16**

Покатилов В.С., Русаков В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Глазкова Я.С., Мацнев М.Е., Ярославцев С.А. Мёссбауэровские исследования мультиферроиков  $\text{BiFeO}_3$  допированных хромом:  $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$  ( $x = 0.0 - 0.30$ )

Pokatilov V.S., Pusakov V.S., Belik A.A., Sigov A.S., Glaskova J.S., Machnev M.E., Yaroslavtsev S.A. Mössbauer study of Cr-doped BiFeO<sub>3</sub>: BiFe<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $x = 0.00 - 0.30$ )

### **P I-17**

Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А. Температурные исследования пространственной спин-модулированной структуры мультиферроика BiFe<sub>0.95</sub>Cr<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub> методами мёссбауэровской спектроскопии

Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A. Temperature studies of the spatial spin-modulated structure of multiferroic BiFe<sub>0.95</sub>Cr<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub> by Mössbauer spectroscopy

### **P I-18**

Панчук В.В., Ломанова Н.А., Семенов В.Г., Гусаров В.В., Иркаев С.М. Распределение атомов железа в фазах Ауривиллиуса по данным спектроскопии ЯГР

Panchuk V.V., Lomanova N.A., Semenov V.G., Gusarov V.V., Irkaev S.M. Distribution of Fe atoms in Aurivillius phases obtained with Mössbauer spectroscopy

### **P I-19**

Sobolev A.V., Belik A.A., Glazkova Y.S., Ovanesyanyan N.S., Presniakov I.A. Local crystal and magnetic structure of Ag<sub>2</sub>FeO<sub>2</sub> and Ag<sub>2</sub>Ga<sub>0.98</sub><sup>57</sup>Fe<sub>0.02</sub>O<sub>2</sub>: a <sup>57</sup>Fe Mössbauer study

### **P I-20**

Соболев А.В., И. Вэй, Пресняков И.А., Глазкова Я.С., Белик А.А. Мёссбауэровское исследование распределения катионов в кобальтитах-ферритах ScCo<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub>

Sobolev A.V., Yi Wei, Presniakov I.A., Glazkova I.S., Belik A.A. <sup>57</sup>Fe Mössbauer investigation of cation distribution in ScCo<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub> cobaltites-ferrites

### **P I-21**

Сопина Ю.В., Погорельцев А.И., Шмидт С.В., Матухин В.Л., Шмидт Е.В. Особенности распределения спиновой плотности в CuFeS<sub>2</sub> по данным ЯМР <sup>63,65</sup>Cu в локальном поле

Sopina Yu.V., Pogoreltsev A.I., Schmidt S.V., Matukhin V.L., Schmidt E.V. Peculiarity of spin density distribution in CuFeS<sub>2</sub> by results of NMR <sup>63,65</sup>Cu in the internal magnetic field

### **P I-22**

Хасанов Р.Н., Гильмутдинов И.Ф., Вагизов Ф.Г., Мухамедшин И.Р. Исследование магнитных свойств натриевых кобальтатов, допированных ионами железа

Khasanov R.N., Gilmutdinov I.F., Vagizov F.G., Mukhamedshin I.R. Magnetic properties of Fe-doped sodium cobaltates

### **P I-23**

Шипко М.Н., Коровушкин В.В., Степович М.А., Костишин В.Г. Мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования соединений в системе BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Shipko M.N., Korovushkin V.V., Stepovich M.A., Kostishin V.G. Mössbauer and X-ray diffraction analysis of compounds in the system BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

### **P I-24**

Volfova L., Cesnek M., Lančok A. Study of nanocrystallized NANOPERMs-type metallic glass

## **P I-25**

Voronina E.V., Chistyakova N.I., Pyataev A.V., Chumakov A.I., Ivanova A.G., Arzhnikov A.K. Magnetic phase separation in systems with long-period magnetic structures exploring by Mössbauer spectroscopy

## **Секция II. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры**

**Председатель – Чистякова Н.И.**

**Topic II. Surface, thin films and nanosystems**

**Chair – Chistyakova N.I.**

## **P II-1**

Абдуллин А.Ф., Пятаев А.В., Домрачева Н.Е., Груздев М.С. Мёссбауэровское исследование поверхности наночастиц core-shell типа

Abdullin A. F., Pyataev A. V., Domracheva N. E., Gruzdev M. S. Mössbauer study of the surface of core-shell type nanoparticles

## **P II-2**

Baskakov A.O., Starchikov S.S., Shih K.-Ya., Lin C.-R., Lyubutin I.S. Mössbauer and Raman spectroscopy study of graphene - magnetite nanocomposites

## **P II-3**

Gaifullin R.R., Deminov R.G., Tagirov L.R., Karminskaya T.Yu., Kupriyanov M.Yu., Fominov Ya.V. and Golubov A.A. Distribution of condensate functions in superconducting triplet spin-valve switching modes

## **P II-4**

Gervits N.E., Starchikov S.S., Lin C.-R., Lyubutin I.S. Magnetic, structural and electronic properties of FeGa<sub>2</sub>O<sub>4</sub> - FeGaO<sub>3</sub> nanocomposites

## **P II-5**

Заматовский А.Е., Шабашов В.А., Коршунов Л.Г. Мёссбауэровский анализ структуры в области контактного нагружения высокоазотистой хромо-марганцевой аустенитной стали

Zamatovsky A.E., Shabashov V.A., Korshunov L.G. Mössbauer analysis of the structure in contact loading of high chromium-manganese austenitic steel

## **P II-6**

Зиннатуллин А.Л., Гумаров А.И., Гильмутдинов И.Ф., Валеев В.Ф., Хайбуллин Р.И., Вагизов Ф.Г. Мёссбауэровские исследования магнитных свойств тонких пленок оксида цинка, имплантированных ионами железа

Zinnatullin A. L., Gumarov A. I., Gilmutdinov I. F., Valeev V. F., Khaibullin R. I., Vagizov F. G. Mössbauer studies of magnetic properties of iron implanted zinc oxide thin films

## **P II-7**

Латыпова Р.И., Дулов Е.Н., Хайбуллин Р.И. Микроструктура и магнитные свойства пленок титаната стронция, имплантированного железом

Latypova R.I., Dulov E.N., Khaibullin R.I. Microstructure and magnetic properties of strontium titanate implanted with iron ions

## Р II-8

Лядов Н.М., Базаров В.В., Вагизов Ф.Г., Шустов В.А., Дулов Е.Н., Носков А.И., Хайбуллин Р.И., Файзрахманов И.А. Анализ структуры и магнитно-фазового состава плёнок  $^{57}\text{Fe}$ , сформированных по технологии ионно-стимулированного осаждения

Lyadov N.M., Bazarov V.V., Vagizov F.G., Shustov V.A., Dulov E.N., Noskov A.I., Khaibullin R.I., Faizrahmanov I.A. Analysis of the structure and magnetic phase composition of the films grown by ion-beam assisted deposition technology

## Р II-9

Озерной А.Н., Верещак М.Ф., Манакова И.А., Тлеубергенов Ж.К. Исследование состояния имплантированных атомов  $^{57}\text{Fe}$  в металлических матрицах

Ozernoy A.N., Vereshchak M.F., Manakova I.A., Tleubergenov Zh.K. Study of  $^{57}\text{Fe}$  implanted atoms state in metal matrix

## Р II-10

Тлеубергенов Ж.К., Манакова И.А., Озерной А.Н., Верещак М.Ф. Конверсионная электронная мёссбауэровская спектроскопия металлических нанокмполитов

Tleubergenov Zh.K., Manakova I.A., Ozernoy A.N., Vereshchak M.F. Conversion electron Mössbauer spectroscopy of metallic nanocomposites

## Р II-11

Useinov A., Esmaeili A., Lai Chih-Huang, Useinov N., Lin Hsiu-Hau Tunnel magnetoresistance related with nanoparticle size distribution in magnetic tunnel junctions

## Р II-12

Голобородский Б.Ю., Шабашов В.А., Макаров А.В., Гаврилов Н.В., Козлов К.А., Мамаев А.С. КЭМС поверхностного слоя аустенитной нержавеющей стали, азотированной в плазме электронного пучка

Goloborodsky B.Yu., Shabashov V.A., Makarov A.V., Gavrilov N.V., Kozlov K.A., Mamaev A.S. CEMS of the surface layer of austenitic stainless steel, nitrided in the plasma electron beam

### *Секция III. Перспективные материалы и современные технологии их получения*

*Председатель – Дорофеев Г.А.*

*Topic III. Advanced materials and modern technologies*

*Chair – Dorofeev G.A.*

## Р III-1

Болтакова Н.В., Пятаев А.В. Исследование условий образования клинкерных минералов в процессе обжига керамики

Boltakova N.V., Pyataev A.V. Study of conditions for the formation of clinker minerals during ceramic firing

## Р III-2

Ярославцев С.А., Востров Н.И., Скундин А.М., Кулова Т.Л., Ярославцев А.Б., Русаков В.С. Мёссбауэровские исследования легированных атомами магния литиевых фосфатов железа

при деинтеркаляции лития

*Yaroslavtsev S.A., Vostrov N.I., Skundin A.M., Kulova T.L., Yaroslavtsev A.B., Rusakov V.S.* Mössbauer studies of lithium iron phosphates doped with magnesium under lithium deintercalation

## Р III-3

*Илюшин А.С., Киселева Т.Ю., Русаков В.С., Кабанов В.М., Сангаа Д., Хиразавва Х.* Мёссбауэровское исследование катионного распределения в замещенном магниевом феррите

*Ilyushin A.S., Kiseleva T.Yu., Rusakov V.S., Kabanov V.M., Sangaa D., Hirazawa H.* Mössbauer study of cation distribution in substituted Mg-ferrite

## Р III-4

*Иванова А.Г., Пятаев А.В., Домрачева Н.Е., Груздев М.С.* Спиновые свойства некоторых комплексов Fe(III)

*Ivanova A.G., Pyataev A.V., Domracheva N.E., Gruzdev M.S.* Spin properties of some complexes of Fe(III)

## Р III-5

*Voronina E.V., Ikal Ali Kadim, Yelsukov Eu.P., Arzhnikov A.K., Korolyov A.V.* The synthesis of metastable quasi-ordered ternary alloys  $Fe_{65}Al_{35-x}Sn_x$  ( $x = 5, 10$  at.%) with the use of mechanically alloyed materials as precursors

## Р III-6

*Козлов К.А., Шабашов В.А., Макаров А.В., Заматовский А.Е., Литвинов А.В., Сагарадзе В.В.* Мёссбауэровский анализ структурно-фазовых превращений в высокоазотистой стали 08X22ГА1.24 при термической обработке и больших пластических деформациях

*Kozlov K.A., Shabashov V.A., Makarov A.V., Zamatovsky A.E., Litvinov A.V., Sagaradze V.V.* Mossbauer analysis of the structural-phase transformations in high-nitrogenous steel 08X22ГА1.24 during heat treatment and large plastic deformations

## Р III-7

*Кубрин С.П., Раевский И.П., Сташенко В.В., Гусев А.А., Исупов В.П., Н. Chen, С.-С. Chou, Сарычев Д.А., Титов В.В., Раевская С.И.* Мёссбауэровское исследование влияния механоактивации на магнитные свойства  $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$

*Kubrin S.P., Raevski I.P., Stashenko V.V., Gusev A.A., Isupov V.P., Chen H., С.-С. Chou, Sarychev D.A., Titov V.V. and Raevskaya S.I.* Mössbauer Study of the Effect of Mechanical Activation on the Magnetic Properties of  $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$

## Р III-8

*Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Литвинов А.В., Заматовский А.Е., Ляшков К.А., Катаева Н.В.* Влияние температуры мегапластической деформации на перераспределение углерода и полиморфные фазовые переходы в ГЦК Fe-Ni-C сплавах

*Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Litvinov A.V., Zamatovsky A.E., Lyashkov K.A., Kataeva N.V.* The effect of temperature megaplastic deformation on the redistribution of carbon and polymorphic phase transitions in FCC Fe-Ni-C alloys

## Р III-9

*Савченко А.Г., Медведева Т.М., Коровушкин В.В., Щетинин И.В., Менушенков В.П.,*



*Бордюжин И.Г.* Гистерезисные свойства и эффект Мёссбауэра в порошках быстроокаленного наноконпозиционного сплава (Nd,Zr)-(Fe,Co)-В

*Savchenko A.G., Medvedeva T.M., Korovushkin V.V., Shchetinin I.V., Menushenkov V.P., Boryuzhin I.G.* Hysteresis properties and Mössbauer effect in rapidly solidified (Nd,Zr)-(Fe,Co)-В nanocomposite alloy

### **Р III-10**

*Назипов Р.А., Шустов В.А., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Пятаев А.В.* Изменение ближнего порядка в аморфном сплаве на основе железа при импульсной ионной модификации

*Nazipov R.A., Shustov V.A., Batalov R.I., Bayazitov R.M., Pyataev A.V.* Change of short-range order in iron-based amorphous alloy under the pulsed ion-beam modification

### **Р III-11**

*Петров В.И., Филиппов В.П.* Контроль распределения железа в реакторном бериллии

*Petrov V.I., Filippov V.P.* Iron distribution control in reactor beryllium

### **Р III-12**

*Савченко А.Г., Рафальский А.И., Щетинин И.В., Менушенков В.П.* Гистерезисные свойства и мёссбауэровская спектроскопия наноконпозитов типа  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ , синтезированных методом механоактивации

*Savchenko A.G., Rafalsky A.I., Shchetinin I.V., Menushenkov V.P.* Hysteresis properties and Mössbauer spectroscopy of  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$  nanocomposites synthesized by a mechanical alloying technique

### **Р III-13**

*Сташенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И., Малицкая М.А.* Степень атомного порядка в  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$ , допированном Li

*Stashenko V.V., Raevski I.P., Kubrin S.P., Sarychev D.A., Raevskaya S.I., Malitskaya M.A.* Atomic order in Li-doped  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$

### **Р III-14**

*Сташенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И., Малицкая М.А.* Мёссбауэровские исследования перовскитов  $\text{A}_2\text{FeNbO}_6$  ( $\text{A} = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ )

*Stashenko V.V., Raevski I.P., Kubrin S.P., Sarychev D.A., Raevskaya S.I., Malitskaya M.A.* Mössbauer study of perovskites  $\text{A}_2\text{FeNbO}_6$  ( $\text{A} = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ )

### **Р III-15**

*Столяр С.В., Баяков О.А., Исхаков Р.С., Ярославцев Р.Н., Ладыгина В.П.* Изменение фазового состава биогенных наночастиц ферригидрита в результате ультразвуковой обработки

*Stolyar S.V., Bayukov O.A., Iskhakov R.S., Yaroslavtsev R.N., Ladygina V.P.* The change of phase composition of biogenic ferrihydrite nanoparticles as a result of ultrasonic treatment

### **Р III-16**

*Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Козлов К.А., Литвинов А.В., Катаева Н.В.* Релаксационные структурно-фазовые превращения в Fe-Ni-Al(Ti) сплавах при мегапластической

деформации. Влияние температуры и скорости деформации

*Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Kozlov K.A., Litvinov A.V., Kataeva N.V.* Relaxation of structural-phase transformations in Fe-Ni-Al(Ti) alloys under megaplastic deformation. The effect of temperature and rate of deformation

### **P III-17**

*Филиппов В.П., Хасанов А.М.* Различия в состоянии атомов железа в нано частицах в циркониевых сплавах при малых и больших содержаниях железа

*Filippov V.P., Khasanov A.M.* Differences in iron state in nano particles in zirconium alloys with small and large iron contents

### **P III-18**

*Столяр С.В., Баяков О.А., Исхаков Р.С., Ярославцев Р.Н.* Низкотемпературные исследования наночастиц ферригидрита методом мёссбауэровской спектроскопии

*Stolyar S.V., Bayukov O.A., Iskhakov R.S., Yaroslavtsev R.N.* Low-temperature studies of ferrihydrite nanoparticles using Mössbauer spectroscopy

## **Секция IV. Биологические и медицинские применения**

**Председатель – Камнев А.А.**

**Topic IV. Biological and medical applications**

**Chair – Kamnev A.A.**

### **P IV-1**

*Ахметов М.М., Петухов В.Ю., Гумаров Г.Г., Конов А.Б., Кобыгин Г.Н., Рыбин Д.С.*  $^1\text{H}$  ЯМР исследование раствора лекарственного препарата МАКТ

*Akhmetov M.M., Petukhov V.Yu., Gumarov G.G., Konov A.B., Konygin G.N., Rybin D.S.*  $^1\text{H}$  NMR study of the drug solution MACG

### **P IV-2**

*Поликарпов Д.М., Габбасов Р.Р., Черепанов В.М., Чуев М.А., Логинова Н.А., Лосева Е.В., Никитин М.П., Панченко В.Я.* Перераспределение экзогенного железа между мозгом и селезенкой после введения  $^{57}\text{Fe}_3\text{O}_4$  феррожидкости в мозговой желудочек крысы

*Polikarpov D.M., Gabbasov R.R., Cherepanov V.M., Chuev M.A., Loginova N.A., Loseva E.V., Nikitin M.P., Panchenko V.Y.* Exogenous iron redistribution between brain and spleen after administration  $^{57}\text{Fe}_3\text{O}_4$  ferrofluid in the ventricle of rat brain

### **P IV-3**

*Kamzin A.S., Nazipov R.A.* Mössbauer studies of core/shell nanoparticles based on Fe- $\text{Fe}_3\text{O}_4$  for biomedical applications

### **P IV-4**

*Новакова А.А., Должикова А.В.* Сравнительное мёссбауэровское исследование структурного состояния биогенных и синтезированных наночастиц гетита

*Novakova A.A., Dolzhikova A.V.* Comparative Mössbauer analysis of biogenic and chemically prepared goethites structural state

## **P IV-5**

Семенов В.Г., Панчук В.В., Мурин И.В., Королев Д.В., Афонин М.В., Торопова Я.Г., Печникова Н.А., Галагудза М.М. Мёссбауэровские исследования накопления наноразмерных частиц гидроксида железа в организме лабораторных животных

Semenov V.G., Panchuk V.V., Murin I.V., Korolev D.V., Afonin M.V., Toropova Ya.G., Pechnikova N.A., Galagudza M.M. Mössbauer study of iron hydroxide particles accumulation in laboratory animals

## **P IV-6**

Уразлина Л.Н., Пятаев А.В., Хабибрахманова В.Р., Гараев Р.Р., Ахмеджанов И.Д., Сысоева М.А. Мёссбауэровское исследование комплексообразования железа с меланином чаги

Urazlina L.N., Pyataev A.V., Khabibrakhmanova V.R., Garayev R.R., Akhmedzhanov I.D., Sysoeva M.A. Mössbauer study of chaga melanin complexation by iron

**Секция V. Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь**

**Председатель – Фабричный П.Б.**

**Topic V. Chemistry, petroleochemistry, catalysis, structure and chemical bond**

**Chair – Fabritchnyi P.B.**

## **P V-1**

Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д. О некоторых свойствах комплексных цианидов железа

Dedushenko S.K., Perfiliev Yu.D. On some properties of iron complex cyanides

## **P V-2**

Закарина Н.А., Бродский А.Р., Яскевич В.И., Комашко Л.В., Волкова Л.Д., Ким О.К., Манакова И.А. Изучение низкопроцентных платиновых катализаторов изомеризации n-алканов на пилларированных железом монтмориллонитах

Zakarina N.A., Brodskii A.R., Yaskевич V.I., Komashko L.V., Volkova L.D., Kim O.K., Manakova I.A. Study of low grade platinum catalysts supported by montmorillonite pillaried with iron for n-alkane isomerization

## **P V-3**

Камнев А.А., Тугарова А.В. Исследование комплекса железа(III) с индолил-3-масляной кислотой методами мёссбауэровской и ИК-спектроскопии

Kamnev A.A., Tugarova A.V. Mössbauer and infrared spectroscopic study of iron(III) complex with indole-3-butyric acid

## **P V-4**

Межуев Е.М., Афанасов М.И., Ваттио А., Фабричный П.Б. Локальное окружение зондовых ионов  $^{119}\text{Sn}^{4+}$  в объеме и на поверхности ортохромита иттрия при гетеровалентных замещениях

Mezhuev E.M., Afanasov M.I., Wattiaux A., Fabritchnyi P.B. Local surrounding of  $^{119}\text{Sn}^{4+}$  probe ions in the bulk and on the surface of yttrium orthochromite upon heterovalent substitutions

## **P V-5**

Иванова А.Г., Вахин А.В., Воронина Е.В., Пятаев А.В., Нургалиев Д.К., Онищенко Я.В.

## Мёссбауэровская спектроскопия и её применения XIV

---

Мёссбауэровские исследования продуктов термокаталитического воздействия на керогенсодержащую породу

*Ivanova A.G., Vakhin A.V., Voronina E.V., Pyataev A.V., Nurgaliev D.K., Onishchenko Y.V.*  
Mössbauer study of products of the thermocatalytic exposure to kerogen-containing rocks

### **Секция VI. Синхротронное излучение и гамма-оптика**

**Председатель – Вагизов Ф.Г.**

**Topic VI. Synchrotron radiation and gamma optics**

**Chair – Vagizov F.G.**

#### **P VI-1**

*Садыков Э.К., Аринин В.В., Петров Г.И.* Мёссбауэровское рассеяние вперед на FeBO<sub>3</sub> в режиме РЧ переключений поля на ядре

*Sadykov E.K., Arinin V.V., Petrov G.I.* Mössbauer forward scattering on FeBO<sub>3</sub> in RF hyperfine field reversal regime

#### **P VI-2**

*Садыков Э.К., Юричук А.А., Аринин В.В.* Эффект толщины в мёссбауэровской спектроскопии в режиме влияния внешних полей: законы сохранения

*Sadykov E.K., Yurichuk A.A., Arinin V.V.* The thickness effect in Mössbauer spectroscopy in external field influence regime: exact results

### **Секция VII. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие**

**Председатель – Оштрах М.И.**

**Topic VII. Mineralogy geosciences, ecology and a cultural heritage**

**Chair – Oshtrakh M.I.**

#### **P VII-1**

*Антонова А.В., Чистякова Н.И., Шапкин А.А., Родионов И.Д., Жилина Т.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.* Исследования процессов бактериального восстановления атомов железа в структуре магнетита

*Antonova A.V., Chistyakova N.I., Shapkin A.A., Rodionov I.D., Zhilina T.N., Zavarzina D.G., Rusakov V.S.* Studies of bacterial iron reduction process in magnetite structure

#### **P VII-2**

*Анучина М.М., Воробьева Н.А., Панкратов Д.А.* Термические превращения наноразмерного Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> в присутствии гуминовых веществ

*Anuchina M.M., Vorobyeva N.A., Pankratov D.A.* Thermal transformations of nanosized Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> with humic substances

#### **P VII-3**

*Чистякова Н.И., Грачева М.А., Антонова А.В., Шапкин А.А., Жилина Т.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.* Мёссбауэровские исследования процессов восстановления атомов железа в ферригидрите алкалофильной бактерией

*Chistyakova N.I., Gracheva M.A., Antonova A.V., Shapkin A.A., Zhilina T.N., Zavarzina D.G.,*

## Мёссбауэровская спектроскопия и её применения XIV

---

*Rusakov V.S.* Mössbauer studies of iron reduction process in ferrihydrite by alkaliphilic bacterium

### **P VII-4**

*Гусейнов М.М., Таскаев С.В., Камилев И.К., Казанова Э.* Исследование фрагментов метеорита «Челябинский» методом ядерной гамма-резонансной спектроскопии

*Guseynov M.M., Taskaev S.V., Kamilov I.K., Kasanova E.* Study meteorite fragments “Chelyabinsk” by nuclear gamma-resonance spectroscopy

### **P VII-5**

*Седьмов Н.А., Залуцкий А.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.* Мёссбауэровская спектроскопия магнитной фракции из глубоководных океанических отложений

*Sed'mov N.A., Zalutskii A.A., Shkolnikov E.N., Morozov V.V.* Mössbauer spectroscopy of the magnetic fraction from deep ocean sediments

### **P VII-6**

*Медвецкая И.Ю., Чистякова Н.И., Бычков А.Ю., Козеренко С.В., Русаков В.С.* Мёссбауэровские исследования халькогенидов железа

*Medvetskaya I.Yu., Chistyakova N.I., Bychkov A.Yu., Kozerenko S.V., Rusakov V.S.* Mössbauer studies of iron chalcogenides

### **P VII-7**

*Чистякова Н.И., Пчелина Д.И., Шапкин А.А., Заварзина Д.Г., Гаврилов С.Н., Русаков В.С.* Мёссбауэровские исследования процессов биогенного восстановления атомов железа в структуре природного глауконита

*Chistyakova N.I., Pchelina D.I., Shapkin A.A., Zavarzina D.G., Gavrilov S.N., Rusakov V.S.* Mössbauer study of biogenic reduction processes of iron atoms in the structure of natural glauconite

### **P VII-8**

*Пятаев А.В., Валиулина С.И., Иванова А.Г., Воронина Е. В.* Мёссбауэровское исследование глины стыкового соединения бревенчатого сооружения Торецкого поселения

*Pyataev A.V., Valiulina S.I., Ivanova A.G., Voronina E.V.* Mössbauer study of the clay from the log butt-joints of log building at the Toretskoe settlement

### **P VII-9**

*Valiulina S.I., Pyataev A.V., Ivanova A.G., Voronina E.V.* Eastern Europe “triangular” lead-silica glass beads of the 11-early 12th centuries: Mössbauer studies

*Секция VIII. Техника эксперимента и методология*

*Председатель – Дулов Е.Н.*

*Topic VIII. New experimental methods and techniques*

*Chair – Dulov E.N.*

### **P VIII-1**

*Гребенюк А.В., Панчук В.В., Иркаев С.М., Семенов В.Г.* Оптимизация мёссбауэровского эксперимента в геометрии на пропускание

Grebenyuk A.V., Panchuk V.V., Irkaev S.M., Semenov V.G. Optimization of the Mössbauer experiment in the transmission geometry

### **P VIII-2**

Gostev P.A., Bakirov B.A., Dulov E.N. Применение нейросетей в задачах мёссбауэровской спектроскопии

Gostev R.A., Bakirov B.A., Dulov E.N. Artificial neural networks applied to Mössbauer spectroscopy

### **P VIII-3**

Мацнев М.Е., Русаков В.С. Реализация задаваемых пользователем моделей парциальных спектров в программе SpectrRelax

Matsnev M.E., Rusakov V.S. Implementation of user-defined subspectrum models in SpectrRelax

### **P VIII-4**

Назипов Р.А., Выжимов Ю.М., Зюзин Н.А. Неопределенность измерений и новые правила составления метрологических стандартов для методики калибровки спектрометров Мёссбауэра

Nazipov R.A., Vyzhimov Yu.M., Zyuzin N.A. Uncertainty of measurement and new rules drafting documents of metrological standards for calibrate Mössbauer spectrometers

### **P VIII-5**

Петров В.И., Мартыненко С.С., Филиппов В.П. Описание спектров с учетом квадрата лоренциана

Petrov V.I., Martynenko S.S., Filippov V.P. Lorentzian square in description of spectra

### **P VIII-6**

Сташенко В.В., Сарычев А.Д., Сарычев Д.А. Оптимизация характеристик резонансного детектора <sup>57</sup>Fe

Stashenko V.V., Sarychev A.D., Sarychev D.A. Performance of optimization of resonant detector <sup>57</sup>Fe

*Topic I*

*Hyperfine interactions in the solid state physics and magnetism*

# Спектр возбуждений и магнитная динамика неелевского ансамбля антиферромагнитных наночастиц в мёссбауэровской спектроскопии

Чуев М.А.

*Физико-технологический институт РАН, Москва (Россия)*

chuev@ftian.ru

## Excitation spectrum and magnetic dynamics of the Néel's ensemble of antiferromagnetic nanoparticles in Mössbauer spectroscopy

Chuev M.A.

Theoretical approach for describing the excitation spectrum, magnetic dynamics and Mössbauer spectra of the Néel's ensemble of antiferromagnetic nanoparticles with uncompensated magnetic moment will be discussed.

Разработана континуальная модель магнитной динамики ансамбля антиферромагнитных (АФМ) наночастиц в двухподрешеточном приближении, основанная на решении уравнений движения для намагниченностей подрешеток с некомпенсированным магнитным моментом в условиях непрерывного релаксационного процесса. В рамках этой модели предложен и реализован формализм для описания специфической трансформации мессбауэровских спектров поглощения таких систем в зависимости от температуры, которая многократно наблюдалась в экспериментах. В частности, нетривиальная форма энергетического спектра возбуждений в виде четырех нормальных мод однородной прецессии, одетых «шубой» нутаций однородных намагниченностей подрешеток [1], позволяет дать феноменологическое объяснение макроскопических квантовых эффектов, наблюдаемых в спектрах поглощения и описанных ранее в рамках квантово-механической модели ансамбля АФМ наночастиц [2]. Подтверждается также еще один принципиальный вывод, следующий из «квантовой» модели, что наличие некомпенсированного магнитного момента не меняет качественного характера эволюции формы спектров «идеальных» АФМ частиц с температурой, а приводит лишь к небольшим количественным поправкам.

Выражаю благодарность РФФИ за финансовую поддержку этой работы.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Чуев М. А. Нутации намагниченностей подрешеток и их роль в формировании мессбауэровских спектров антиферромагнитных наночастиц / М. А. Чуев // Письма в ЖЭТФ. – 2016. – Т. 103. – № 3. – С. 194–199.
2. Чуев М. А. О термодинамике антиферромагнитных наночастиц на примере мессбауэровской спектроскопии / М. А. Чуев // Письма в ЖЭТФ. – 2012. – Т. 95. – № 6. – С. 323–329.



## Пространственная спин-модулированная структура и сверхтонкие взаимодействия ядер $^{57}\text{Fe}$ в мультиферроиках $\text{BiFeO}_3$ и $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$ ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ )

**Русаков В.С.<sup>1</sup>, Покатилов В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>2</sup>, Белик А.А.<sup>3</sup>, Мацнев М.Е.<sup>1</sup>,  
Гапочка А.М.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Московский технологический университет, Москва (Россия)*

<sup>3</sup>*International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science,  
Tsukuba (Japan)*

rusakov@phys.msu.ru

## Spatial spin-modulated structure and hyperfine interactions of $^{57}\text{Fe}$ nuclei in $\text{BiFeO}_3$ and $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$ ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ ) multiferroics

**Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A., Matsnev M.E.,  
Gapochka A.M., Glazkova Ya.S.**

The results of the Mössbauer studies of  $\text{BiFeO}_3$  and  $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$  ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ ) multiferroics in a wide temperature range including the temperature of magnetic phase transitions have been presented. The Mössbauer spectra have been analyzed in terms of the model of an incommensurate anharmonic spatial spin-modulated structure (SSMS) of cycloid type. Information about the effect of the substitution of Sc, Cr and Mn atoms for Fe atoms on the SSMS and hyperfine parameters of the spectrum has been obtained.

Методом мёссбауэровской спектроскопии проведены детальные исследования влияния замещения атомов Fe атомами Sc, Mn и Cr на пространственную спин-модулированную структуру (ПСМС), а также электрические и магнитные сверхтонкие взаимодействия (СТВ) ядер  $^{57}\text{Fe}$  в мультиферроике  $\text{BiFeO}_3$  в широком диапазоне температур, включающем температуру магнитного фазового перехода. Для всех исследованных ферритов определены температурные области существования несоразмерной ангармонической ПСМС циклоидного типа. Температурные зависимости параметра ангармонизма ПСМС и параметров СТВ указывают на то, что во всех исследованных ферритах в области температур  $\sim 350$  К происходит переход от ПСМС типа «лёгкая ось» к ПСМС типа «лёгкая плоскость». При всех температурах существования ангармонической ПСМС обнаружено увеличение параметра ангармонизма с замещением атомов Fe на атомы Sc, Cr или Mn. Показано, что значение анизотропного вклада в сверхтонкое магнитное поле может быть объяснено только при учете анизотропии магнитного СТВ ядра с электронами ионного остова собственного атома. Установлено, что замещение атома Fe на атом Sc, Cr или Mn в ближайшем окружении атома Fe приводит к уменьшению изотропного вклада в сверхтонкое магнитное поле.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01109а) и Министерства образования и науки РФ (госзадание № 2014/112, проект 1066).

## Magnetic properties of the chain antiferromagnet RbFeSe<sub>2</sub>

**Seidov Z.**<sup>1,2</sup>, **Krug von Nidda H.-A.**<sup>1</sup>, **Tsurkan V.**<sup>1,3</sup>, **Filipova I.**<sup>3</sup>, **Günther A.**<sup>1</sup>, **Aliyev M.**<sup>4</sup>, **Vagizov F.**<sup>5</sup>, **Kiiamov A.**<sup>5</sup>, **Tagirov L.**<sup>5,6</sup>, **Gavrilova T.**<sup>6</sup> and **Loidl A.**<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Experimental Physics V, Center for Electronic Correlations and Magnetism, University of Augsburg, Augsburg (Germany)*

<sup>2</sup>*Institute of Physics, Azerbaijan Academy of Sciences, Baku (Azerbaijan)*

<sup>3</sup>*Institute of Applied Physics, Academy of Sciences of Moldova, Chisinau (Moldova)*

<sup>4</sup>*Baku State University, Chair of the Solid State Physics, Baku (Azerbaijan)*

<sup>5</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>6</sup>*E.K. Zavoisky Physical-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, Kazan (Russia)*

zsyu@rambler.ru

Single crystals of the ternary iron selenide RbFeSe<sub>2</sub> (with linear chains of FeSe<sub>4</sub> tetrahedra) have been investigated by means of X-ray diffraction, Mössbauer, magnetic susceptibility and specific heat measurements. Our Mössbauer experiments performed from room temperature (RT) down to 4.2 K have shown that the compound undergoes a magnetic phase transition near 248 K. Mössbauer parameters determined in the entire temperature range indicate that iron in RbFeSe<sub>2</sub> is in ferric (trivalent) state having strong covalent bonding to selenium ligands. The measured hyperfine field of 216 kOe at 4.2 K is quite reduced compared with that in high-spin ferric compounds. The SQUID susceptibility and specific heat measurements confirm that RbFeSe<sub>2</sub> exhibits 3D collinear antiferromagnetic order below  $T_N = 248$  K with magnetic moments oriented perpendicular to the chain direction. The strict linear increase of the susceptibility to high temperatures strongly suggests a one-dimensional metallic character of RbFeSe<sub>2</sub> along the chains.

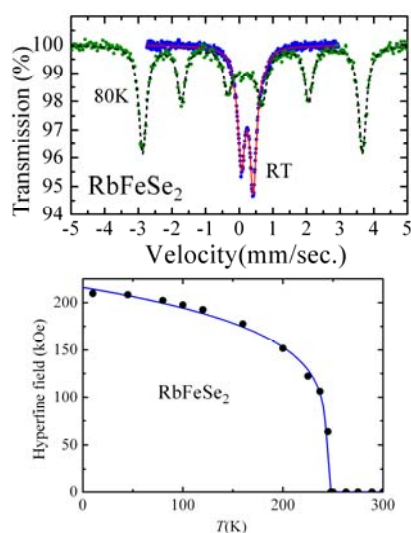


Fig. 1. Mössbauer spectra at RT and 80 K (top), hyperfine field vs temperature (bottom)

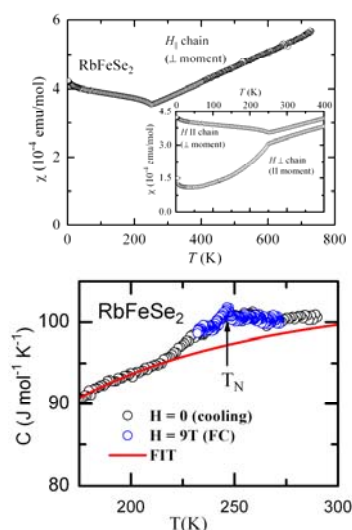


Fig. 2. Magnetic susceptibility vs temperature (top), specific heat vs temperature (bottom)

# Аномальные особенности структурных превращений в слабо легированном барием манганите лантана и их корреляция с физическими свойствами

Седых В.Д.

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка (Россия)*

sedykh@issp.ac.ru

## Anomalous features of structure transformations in Ba-doped lanthanum manganites and their correlation with physical properties

Sedykh V.D.

In the given work the results of investigations of structure transformations in low Ba-doped lanthanum manganite  $\text{La}_{0.95}\text{Ba}_{0.05}\text{MnO}_{3+\delta}$  (with a small amount of Mössbauer isotope  $^{57}\text{Fe}$  (2 %)) after different heat treatment conditions are presented by Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction analysis. Interrelation of anomalous features of magnetic and transport properties with structure transformations in low Ba-doped lanthanum manganite is discussed.

Среди легированных манганитов лантана соединения, легированные барием, вызывают повышенный интерес. В первую очередь это связано с наличием в них ряда аномальных особенностей магнитных и транспортных свойств. Обнаружено, что в этих оксидах происходит структурно-фазовое расслоение в области низких температур, магнитное расслоение с образованием смеси двух ферромагнитных фаз с разным намагничением, аномальное поведение эффективной теплоёмкости и восприимчивости [1]. Наиболее существенные изменения происходят в слаболегированном манганите  $\text{La}_{0.95}\text{Ba}_{0.05}\text{MnO}_3$  [2], в области низких температур сосуществуют ферро- и антиферромагнитное упорядочение: ( $T_N = 123.6$  К и  $T_C = 136.7$  К), т.е. происходит магнитное фазовое расслоение.

В данной работе представлены результаты исследований мёссбауэровской спектроскопией и рентгеновской дифракцией структурных перестроек в слаболегированном барием манганите лантана  $\text{La}_{0.95}\text{Ba}_{0.05}\text{MnO}_{3+\delta}$  (с добавкой мёссбауэровского изотопа  $^{57}\text{Fe}$  (2 %)) В работе обсуждается связь аномальных особенностей магнитных и транспортных свойств со структурной перестройкой в слаболегированном барием манганите лантана.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Beznosov A.B.* Magnetic and neutron diffraction study of  $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_3$  perovskite manganite / A.B. Beznosov, V.A. Desnenko, E.L. Fertman, et al. // Phys. Rev. B. – 2003 – V. 68. – №. 5. – P. 054109.
2. *Дубинин С.Ф.* Фазовое расслоение в кристалле манганита  $\text{La}_{0.95}\text{Ba}_{0.05}\text{MnO}_3$  / С.Ф. Дубинин, А.В. Королёв, С.Г. Теплоухов и др. // ФТТ. – 2008. – Т. 50. – №. 1. – С. 69.

## Наблюдение сверхпроводимости в сероводороде с помощью эффекта Мёссбауэра при высоких давлениях

**Троян И.А.<sup>1</sup>, Гаврилюк А.Г.<sup>1,2</sup>, Ruffer R.<sup>3</sup>, Чумаков А.И.<sup>3,4</sup>, Любутин И.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН, Москва (Россия)

<sup>3</sup>European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France)

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва (Россия)

itrojan@mail.ru

### Observation of superconductivity in hydrogen sulfide by the Mössbauer effect at high pressures

Troyan I.A., Gavriiliuk A.G., Ruffer R, Chumakov A.I., Lyubutin I.S.

High temperature superconductivity remains in focus of experimental and theoretical research. The hydride H<sub>2</sub>S has been reported to be superconducting at high pressures and with a high transition temperature. We report on the direct observation of the shielding of the magnetic field in H<sub>2</sub>S compressed to 153 GPa. A thin <sup>119</sup>Sn film placed into the H<sub>2</sub>S sample volume was used as a sensor of the magnetic field inside the superconductor. The magnetic field at the <sup>119</sup>Sn sensor was monitored using nuclear resonance scattering of synchrotron radiation from the Mössbauer <sup>119</sup>Sn nuclei. Our results demonstrate that an external static magnetic field of about 0.7 Tesla is screened from the <sup>119</sup>Sn foil due to the shielding by the H<sub>2</sub>S sample at temperatures between 4.7 and approximately 145 K, revealing a superconducting state of H<sub>2</sub>S.

Работа посвящена исследованию сверхпроводимости в сероводороде, в котором при высоком давлении предсказываются рекордные значения критической температуры (выше 200 К). Использована синхротронная мёссбауэровская спектроскопия для детектирования магнитного поля в объёме сверхпроводящего сероводорода, находящегося при давлении 150 ГПа. Предложен и реализован способ измерения магнитного поля внутри сверхпроводящего образца H<sub>2</sub>S, находящегося при высоком давлении в камере с алмазными наковальнями [1]. В качестве сенсора (датчика) магнитного поля использована фольга олова, обогащенная мёссбауэровским изотопом Sn-119. Исследованы значения магнитного поля в сверхпроводящем сероводороде при давлении 150 ГПа в зависимости от температуры. Установлено, что сильно сжатый сероводород эффективно экранирует магнитный поток до температуры 145 К при величине магнитного поля 0.7 Тл. Доказано, что этот материал является сверхпроводником второго рода с высокими критическими параметрами [1].

Работа поддерживается грантами РФФИ № 14-02-00848 и РФФИ № 14-02-00483.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Troyan I.* Observation of superconductivity in hydrogen sulfide from nuclear resonant scattering / Troyan I. et al. // *Science*. – 2016. – V. 351. – №. 6279. – P. 1303-1306.

## Valence mixing and charge ordering in the $R\text{BaFe}_2\text{O}_5$ double perovskite ( $R=\text{Y, Gd, Tb or Ho}$ )

**Lindén Johan K. M.<sup>1</sup>, Karen Pavel<sup>2</sup>, Lindroos Fredrik J.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Åbo Akademi university, Physics Department FI-20500 Turku (Finland)*

<sup>2</sup>*University of Oslo, Department of Chemistry N-0315 Oslo (Norway)*

jlinden@abo.fi

Fe-based double-perovskites of the general formula  $R\text{BaFe}_2\text{O}_5$ , where  $R$  is a rare-earth element increasing in size from holmium to neodymium, can be synthesized under reductive conditions. The structure was originally synthesized using equal amounts of Fe and Cu [1]. The 100% Fe-based samples exhibit charge-ordering of divalent and trivalent Fe below a Verwey-transition temperature  $T_V$  and valence-mixing above a premonitory transition temperature  $T_p$ . Both  $T_V$  and  $T_p$  depend on the size of the chosen  $R$  element, but typically  $T_p$  is slightly below room temperature and  $T_V$  is 30–40 K below that. Between  $T_V$  and  $T_p$  intermediate iron valences of  $+3-\delta$  and  $+2+\delta$ , respectively are observed.

In the charge-ordered state the structure is strongly orthorhombic, but upon passing  $T_V$  the orthorhombicity decreases substantially. Upon passing  $T_p$  no discernable changes in the structure, determined by synchrotron XRD, is observed, yet the Mössbauer spectra changes substantially. It turns out that the 6th  $d$  electron of iron is mainly responsible for the changes observed in the quadrupole splitting, internal magnetic field and isomer shift. A small stiffening of the lattice is also observed upon passing  $T_V$ , witnessed by an increase in the Debye temperature, obtained from fitting the second order Doppler shift to the isomer shift data.

We have modelled the population of the 6th  $d$  electron using the experimentally obtained hyperfine parameters. Theoretical values for the contributions to the EFG when the  $d$  electron is located in mainly the  $d_{xz}$ ,  $d_{x^2-y^2}$  and  $d_z^2$  orbitals and point-charge estimates for the lattice EFG:  $s$  were used. Spin-only field values were obtained from the 5 K Mössbauer data. Dipolar and orbital fields were calculated from the  $d$ -electron populations. In the charge-ordered state the  $d$  electron occupies the  $d_{xz}$  orbital of the divalent Fe species, explaining the large orthorhombic distortion, while above  $T_p$  the  $d_z^2$  orbital is favored, with some presence at  $d_{x^2-y^2}$ . This is in accord with DFT calculations reported in the literature [2].

### REFERENCES

1. *Er-Rakho L.*  $\text{YBaCuFeO}_{5+\delta}$ : A novel oxygen deficient perovskite with layered structure / L. Er-Rakho, C. Michel, P. Lacorre, B. Raveau // *Journal of Solid State Chemistry*. – 1988. –V. 73. – № 2. – P. 531–535.
2. *Spiel C.* Density functional calculations on the charge-ordered and valence-mixed modification of  $\text{YBaFe}_2\text{O}_{5+w}$  / C. Spiel, P. Blaha, K. Schwarz // *Physical Review B*. – 2009. –V. 79. – № 11. – P. 115123–13.

# Исследование аморфных сплавов $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$ ( $x = 0-20$ ) методом ЯМР на ядрах $^{11}\text{B}$ и эффекта мёссбауэра на ядрах $^{57}\text{Fe}$

**Покатилов В.С.<sup>1</sup>, Сигов А.С.<sup>1</sup>, Китаев В.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону (Россия)

pokatilov@mirea.ru

## $^{11}\text{B}$ NMR and $^{57}\text{Fe}$ Mössbauer study of amorphous

### $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$ ( $x = 0-20$ ) alloys

Pokatilov V.S., Sigov A.S., Kitaev V.V.

Local atomic and magnetic structures of  $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x = 0-20$ ) amorphous alloys were studied by nuclear magnetic resonance at  $^{11}\text{B}$  nuclei at 4.2 K and  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectroscopy at  $^{57}\text{Fe}$  nuclei at 16 K and  $T > T_C$ . These alloys consist of nanoclusters. Boron and iron atoms have short-range order of the tetragonal  $(\text{Fe,Cr})_3\text{B}$  and  $\alpha - \text{Fe}(\text{Cr})$  phase type. It has been found that the substitution of Fe atoms by Cr atoms disturbs the local magnetic moments of iron atoms.

Цель работы – исследование влияние замещения атомов железа атомами хрома на локальную атомную и магнитную структуру в аморфных сплавах  $\text{Fe}_{80-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x = 0-20$ ) методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах  $^{11}\text{B}$  при 4.2 К и эффекта Мёссбауэра на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  при 16 К и  $T > T_C$ . Аморфные сплавы  $\text{Fe}_{80-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x = 0-20$ ) были получены методом сверхбыстрой закалки расплава. Спектры ЯМР измерялись при 4.2 К в области частот 1–50 МГц. Спектр сплава  $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$  имеет слегка асимметричную форму с максимумом при  $f_M = 37.6$  МГц. Замещение атомов железа на атомы хрома приводит к уширению спектров, смещению их в сторону меньших частот и появлению дополнительного неразрешенного пика со стороны низких частот. При  $x = 15$  и 20 максимумы спектров сильно смещены к низким частотам и лежат при 20.0 и 18.5 МГц, соответственно. Введение атомов хрома в аморфные сплавы уширяет мёссбауэровские спектры. Распределения сверхтонких магнитных полей (СТМП) показывают, что при 16 К средние СТМП уменьшаются от 290 кЭ при  $x = 0$  до 100 кЭ при  $x = 20$ , а ширина распределений СТМП увеличивается от 90 до 200 кЭ, соответственно. Из данных мёссбауэровских исследований аморфных сплавов при температурах выше температур Кюри определены локальные структурные состояния атомов железа в аморфных сплавах. В результате исследований установлено, что аморфные сплавы  $\text{Fe}_{80-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$  ( $x = 0-20$ ) состоят из нанокластеров типа  $\alpha - \text{Fe}(\text{Cr})$  и тетрагонального борида  $(\text{Fe} < \text{Cr})_3\text{B}$ . Получены данные о локальных магнитных моментах атомов Fe и влиянии на них допирования аморфных сплавов атомами Cr.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-02-14016) и Минобрнауки РФ (проект № 3.1137.2014К).

# Особенности ЯМР спектроскопии на ядрах $^{57}\text{Fe}$ в мультиферроике $\text{BiFeO}_3$

**Покатилов В.С.<sup>1</sup>, Русаков В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

pokatilov@mirea.ru

## Features of $^{57}\text{Fe}$ NMR spectroscopy in the multiferroic $\text{BiFeO}_3$

Pokatilov V.S., Rusakov V.S., Sigov A.S.

The influence of concentration of  $^{57}\text{Fe}$  isotope and dynamic effects on the shape of the NMR spectrum in the multiferroic  $\text{BiFeO}_3$  was studied by pulsed nuclear magnetic resonance at 4.2 K.

Методом нейтронографии установлено, а методом ЯМР на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  подтверждено, что мультиферроик  $\text{BiFeO}_3$  обладает пространственной спин-модулированной структурой (ПСМС) циклоидного типа. Форма ЯМР-спектра позволяет установить существование ПСМС и определить параметр ангармонизма  $m$ . Недавние исследования [1] показали, что для корректного определения параметра  $m$  при анализе формы спектра ЯМР необходимо учитывать влияние динамических эффектов.

Целью данной работы является изучение влияния динамических эффектов на форму ЯМР-спектра и параметры ПСМС в мультиферроике  $\text{BiFeO}_3$ . Исследования проводились на двух образцах соединения  $\text{BiFeO}_3$  с относительным содержанием стабильного изотопа  $^{57}\text{Fe}$  в количестве 95 ат.% и 10 ат.%. Измерения были выполнены на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  методом импульсного ЯМР при 4.2 К. Исследование динамических эффектов показало сильное влияние амплитуды высокочастотного магнитного поля, времени  $T_2$  поперечной релаксации и значений коэффициентов усиления на форму спектра ЯМР. Существенный вклад в наблюдаемое  $T_2$  вносит сул-накамуровское косвенное взаимодействие, которое зависит от концентрации ядер  $^{57}\text{Fe}$  в исследованных образцах. Расшифровка ЯМР-спектров с учетом вкладов динамических эффектов проведена в рамках модели ПСМС циклоидного типа, реализованной в программе SpectrRelax. В результате получены распределение сверхтонкого магнитного поля и значение параметра ангармонизма  $m = 0.25 \pm 0.07$ , которое хорошо согласуется с результатами нейтронографических исследований.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01109а) и Минобрнауки РФ (госзадание № 2014/112 проект № 1066).

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Покатилов В.С.* Исследование мультиферроика  $\text{BiFeO}_3$  методом ядерного магнитного резонанса на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  / В.С. Покатилов, А.С. Сигов // ЖЭТФ. – 2010. – Т. 137. – Вып. 3. С. 498–504.

## Zero-field NMR, Mössbauer effect and neutron diffraction in CuFeS<sub>2</sub>

**Gainov R.R.<sup>1,2</sup>, Golovanevskiy V.A.<sup>3,4</sup>, Vagizov F.G.<sup>1</sup>, Khassanov R.R.<sup>1</sup>,  
Douglav A.V.<sup>1</sup>, Nemkovskii K.<sup>5</sup>, Prokes K.<sup>2</sup>, Yokaichiya F.<sup>2</sup>, Russina M.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Berlin (Germany)*

<sup>3</sup>*Curtin University of Technology, Kent St., Bentley, Perth (Australia)*

<sup>4</sup>*Tomsk Polytechnic University, Tomsk (Russia)*

<sup>5</sup>*Forschungszentrum Jülich GmbH (JCNS), Jülich (Germany)*

g\_ramil@mail.ru

Recent low-temperature studies of antiferromagnetic semiconductor CuFeS<sub>2</sub> with  $T_N = 823$  K by NMR and Mössbauer effect have revealed the second-order phase transition around 50 K [1]. Antiferromagnetism is caused by Fe electronic spins. The transition observed is connected, likely, with Cu electronic spins having quite small magnetic moments (less than  $0.05 \mu_B$ ), which is in agreement with previous powder neutron diffraction results [2, 3]. On the other hand, the nature of the low-temperature magnetic state of chalcogenides in general is still unclear. For example, XAFS investigation points to the lack of influence of Cu spins on the phase transition at 50 K [4]. As result, preliminary neutron diffraction studies of a unique single-crystal sample of natural CuFeS<sub>2</sub> have been carried out at low temperatures in order to clarify the previous data for powder samples, including structural and valence state properties. The single-crystal neutron diffraction data is preferable to that of the powder samples because of the gain in the Bragg peak intensities. First results prove the presence of the 50 K phase transition. The character of the temperature dependence points to the structural transformations, which influence on the behavior of electronic spins. The report presents the results of experimental studies of chalcopyrite CuFeS<sub>2</sub> and a discussion of the observed electronic and magnetic properties.

This work is supported partly by the project BMBF-05K12CB1.

### REFERENCES

1. *Golovanevskiy V.A.* Low-temperature Mössbauer and NMR spectroscopy studies of selected Cu-Fe-S chalcogenides / V.A. Golovanevskiy, R.R. Gainov, V.V. Klekovkina, F.G. Vagizov, et al. // Conference proceedings ICAME-2013, Croatia. – 2013. – P.28.
2. *Donnay G.* Symmetry of magnetic structures: magnetic structure of chalcopyrite / G. Donnay, L.M. Corliss, J.D.H. Donnay, N. Elliot, J.M. Hasting // Phys. Rev. – 1958 – V. 112. – № 6. – P. 1917-1923.
3. *Woolley J.C.* Low temperature magnetic behaviour of CuFeS<sub>2</sub> from neutron diffraction data / J.C. Woolley, A.-M. Lamarche, G. Lamarche, et al. // J.M.M.M. L62. – 1996. – P. 347-354.
4. *Lovesey S.W.* Acentric magnetic and optical properties of chalcopyrite (CuFeS<sub>2</sub>) / S.W. Lovesey, K.S Knight, C. Detlefs, S.W. Huang, V. Scagnoli, U. Staub // J. Phys.: Condens. Matter. – 2012. – V. 24. – P 216001.



## Низкотемпературные мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования ферроборатов $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ( $R = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$ )

**Фролов К.В.<sup>1</sup>, Любутин И.С.<sup>1</sup>, Смирнова Е.С.<sup>1</sup>, Алексеева О.А.<sup>1</sup>, Верин И.А.<sup>1</sup>,  
Безматерных Л.Н.<sup>2</sup>, Гудим И.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»  
РАН, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Институт физики им Л.В. Куренского СО РАН, Красноярск (Россия)  
green@crys.ras.ru*

### Low temperature Mössbauer and X-ray structural studies of the ferroborates $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ( $R = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$ )

Frolov K.V., Lyubutin I.S., Smirnova E.S., Alekseeva O.A., Verin I.A.,  
Bezmaternykh L.N., Gudim I.A.

The dynamics of phase transitions, structural, electronic and spin states of iron ions in the rare earth ferroborates  $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $R = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$ ) were performed by the  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectroscopy and single crystal X-ray diffraction methods in the low temperature range of 5–295 K.

Методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  и монокристалльного рентгеноструктурного анализа исследованы кристаллическая структура, динамика фазовых переходов, структурные, электронные и спиновые состояния ионов железа в редкоземельных ферроборатах  $R\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $R = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$ ) в интервале температур 5 – 295 К. Обнаружено аномальное возрастание параметра элементарной ячейки  $c$  при понижении температуры ниже 80 К во всех исследованных монокристаллах. Изучено взаимодействие редкоземельной и железной магнитных подсистем и его влияние на формирование мультиферроидных свойств редкоземельных боратов железа. В соединениях  $\text{YFe}_3(\text{BO}_3)_4$  и  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  в области магнитного фазового перехода обнаружен температурный гистерезис сверхтонких мёссбауэровских параметров, не наблюдающийся в соединениях  $\text{SmFe}_3(\text{BO}_3)_4$  и  $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ .

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

## **Квантовая модель магнитной динамики однодоменных частиц для описания их кривых намагничивания и мёссбауэровских спектров в слабом магнитном поле**

**Мищенко И.Н.<sup>1</sup>, Чуев М.А.<sup>1</sup>, Черепанов В.М.<sup>2</sup>, Поликарпов М.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Физико-технологический институт Российской академии наук, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт», Москва (Россия)*

IlyaMischenko@rambler.ru

## **Quantum model of single-domain particles' magnetic dynamics for description of their magnetization curves and Mössbauer spectra in a weak magnetic field**

Mischenko I.N., Chuev M.A., Cherepanov V.M., Polikarpov M.A.

On the base of solution of the quantum-mechanical problem concerning particle with spin  $S$ , possessing intrinsic magnetic anisotropy and being placed in non-collinear external magnetic field, we proposed a universal approach to describing relaxation Mössbauer spectra and equilibrium magnetization curves of magnetic nanoparticles for consistent analysis of magnetometry and gamma-resonance experimental data.

Исследования структурных, магнитных и динамических свойств малых частиц методом мёссбауэровской спектроскопии обычно проводят, основываясь на температурной эволюции их кривых резонансного поглощения. При интерпретации экспериментальных данных о подобных объектах естественно привлечение многоуровневых моделей, описывающих тепловые возбуждения спинов наночастиц [1]. Однако существует и другая, не столь распространённая, но не менее информативная методика измерения спектров в слабом внешнем магнитном поле, выявляющая как внутренние поля самих частиц, так и обменные взаимодействия в их ансамблях. Для описания такой ситуации недавно было предложено обобщение стандартной модели [1], где снимается ограничение аксиальной симметрии на энергетический профиль частицы [2]. Разработанный подход применим не только в случае равновесных мёссбауэровских спектров или кривых намагничивания, но и допускает расширение в область динамических эффектов, например, магнитного гистерезиса.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 14-15-01096.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Jones D.H. Many-state relaxation model for the Mössbauer spectra of superparamagnets / D.H. Jones, K.K.P. Srivastava // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 34. – P. 7542–7548.

2. Чуев М.А. Многоуровневая релаксационная модель для описания мёссбауэровских спектров наночастиц в магнитном поле / М.А. Чуев // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 141 – Вып. 4 – С. 698–722.

## Исследование особенностей формирования структуры упорядочивающегося сплава FePd

**Клейнерман Н.М., Сериков В.В., Власова Н.И., Попов А.Г.**

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*

kleinerman@imp.uran.ru

### Study of peculiarities of structure formation in FePd ordered alloy

Kleinerman N.M., Serikov V.V., Vlasova N.I., Popov A.G.

The aim of the work is to ascertain and compare, in terms of Mössbauer parameters, structure changes in the process of annealing of Fe<sub>50</sub>Pd<sub>50</sub> alloys at T = 450–500°C from different initial states: as cast and quenched from 950°C; subjected then to severe plastic deformation by shear under pressure, and melt-spun. Conclusions on the difference in the kinetics of the processes of phase transformation depending on the initial state of the material are made.

В настоящее время интерес к  $L1_0$  сплавам, и в частности FePd, связан с поиском материалов для постоянных магнитов, не содержащих редкоземельные элементы. Уровень магнитных свойств зависит от таких структурных факторов как фазовый состав, степень порядка, размер зерна, искажения решетки и т.д. Одной из особенностей  $A1-L1_0$  превращения, обнаруженной в работе [1], является формирование промежуточной ОЦТ-фазы типа  $A6$ . Исследования с помощью мёссбауэровской спектроскопии позволяют выявить тонкие особенности структурных превращений, анализ которых может помочь в разработке способов повышения магнитных характеристик. Целью работы было определить структурные изменения в процессе отжига сплавов Fe<sub>50</sub>Pd<sub>50</sub> при T = 450–500°C из различных исходных состояний: литого и закаленного от 950°C; подвергнутого затем интенсивной пластической деформации; быстрозакаленного из расплава. С помощью программного пакета MTOOLS [2] проводили как построение двухъядерных распределений вероятностей сверхтонких полей, так и разложение спектров на парциальные вклады. Из сопоставления данных, полученных после отжигов разной продолжительности, выявлены новые детали структурного перехода  $A1-L1_0$  и сделаны выводы о различиях в кинетике фазовых превращений в сплаве в зависимости от исходного состояния.

Работа выполнена при поддержке УрО РАН (проект №15-9-2-19).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Vlasova N.I.* Discovery of metastable tetragonal disordered phase upon phase transitions in the equiatomic nanostructured FePd alloy / N. I. Vlasova, A. G. Popov, N. N. Shchegoleva, V. S. Gaviko, et al. // Acta Mat. – 2013. – V. 61. – P. 2560–2570.
2. *Русаков В.С.* Мёссбауэровская спектроскопия локально неоднородных систем / В.С. Русаков – Алматы. – 2000. – 437 с.

## First-principles calculations of alloyed cementite (Fe-Ni)<sub>3</sub>C

Dobysheva L.V.

*Physical-Technical Institute, Ural Branch, Russian Academy of Science, Izhevsk (Russia)*

lyuka17@mail.ru

Cementite, which exists as a dispersed phase in a carbon steel, strongly affects its mechanical and magnetic properties. Alloying elements in a steel can also enter a lattice of cementite, thus, affecting size, form, and properties of the cementite particles. In particular Ni, which is used in steels for improving their mechanical properties and is not a carbide former, was shown [1] to enter the lattice of cementite and change its magnetic properties.

In [2] cementite with Ni was obtained by mechanical alloying followed by a thorough annealing, the method being able to produce samples with a high content of cementite (up to 95–100 %) [3]. The samples obtained were studied in [2] by X-ray diffraction and magnetic measurements and Mössbauer spectroscopy. Interpretation of experiments and understanding the underlying processes is hindered by the fact that distribution of Ni in the samples was not uniform: the susceptibility curve showed two Curie temperatures at 220 and 240 °C, both being a bit higher than that of pure cementite. So, the authors considered this as evidence of two types of cementite, namely, Ni-enriched and Ni-depleted cementite.

In this work we have conducted first-principles calculations of electron structure of cementite with Ni replacing iron atoms with concentration close to that in [2]. The unit cell was fully relaxed through finding minimum of total energy over the lattice parameters and atomic positions. The calculated values of atomic magnetic moments, hyperfine parameters at Fe nuclei are used for interpretation of the magnetic and Mössbauer experimental data.

This work was supported by the Ural Branch of Russian Academy of Sciences № 15-6-2-16.

### REFERENCES

1. *Shigematsu T.* Magnetic properties of cementite (Fe<sub>1-x</sub>Me<sub>x</sub>)<sub>3</sub>C, (Me; Cr or Ni) / Toshihiko Shigematsu // *J. Phys. Soc. Jap.* – 1974. – V.37. – №. 4. – P. 940–946.
2. *Ulyanov A.L.* Formation of the Ni-doped cementite under mechanochemical synthesis and subsequent annealing / A.L. Ulyanov, A.I. Ulyanov, A.A. Chulkina, E.P. Yelsukov // XIV Международная конференция «Мёссбауэровская спектроскопия и её применения», 28 сентября – 1 октября 2016: сборник материалов. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2016, с 104.
3. *Elsukov E. P.* Mechanically alloyed Fe(100 - x)C(x) (x = 5-25 at. %) powders: I. Structure, phase composition, and temperature stability / E. P. Elsukov, G. A. Dorofeev, V. M. Fomin, G. N. Konygin, A. V. Zagainov, A. N. Maratkanova // *The Physics of Met. and Metallog.* – 2002. – V. 94. – № 4. – P. 356–366.

# Обзор работ по ядерному резонансному рассеянию на ESRF

Чумаков А.И.

*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France)*

chumakov@esrf.fr

## Review of nuclear resonance scattering studies at the ESRF

Chumakov A.I.

A review of recent studies of superconductivity [1], nanomagnetism [2], strongly correlated systems [3], magnetism and dynamics of 2D systems [4], geophysics [5], etc., performed at the Nuclear Resonance beamline of the European Synchrotron Radiation Facility is presented.

Станция ядерного резонансного рассеяния ID18 Европейского Центра Синхротронного Излучения (ESRF) позволяет Российским учёным проводить исследований (а) электронных и магнитных свойств и (б) атомной динамики методами ядерного резонансного рассеяния.

Заявки на проведение экспериментов принимаются от любого исследователя. Работа в Центре не требует оплаты от подающих заявки Российских исследователей, так как финансирование Центра осуществляется в рамках правительственных программ стран-участниц, в число которых входит Россия, и включает в себя оплату всех затрат пользователей, в том числе проживание, питание и проезд.

В докладе рассказывается об исследованиях в области сверхпроводимости [1], наномagnetизма [2], систем с сильными электронными корреляциями [3], магнетизма и динамики 2-мерных систем [4], геофизики [5] и других, выполненных на станции ядерного резонансного рассеяния.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Troyan I.* Observation of superconductivity in hydrogen sulfide from nuclear resonant scattering / I. Troyan, A. Gavriluk, R. Rüffer, A. Chumakov, et al. // *Science*. – 2016. – V. 351. – №. 6279. – P. 1303-1306.
2. *Merkel D.G.* Evolution of magnetism on a curved nano-surface / D. G. Merkel, D. Bessas, Z. Zolnai, R. Rüffer, et al. // *Nanoscale*, – 2015. – V. 7. – P. 12878.
3. *Parshin P.P.* Experimental observation of phonons as spectators in FeSi electronic gap formation / P. P. Parshin, A. I. Chumakov, P. A. Alekseev, K. S. Nemkovski et al. // *Phys. Rev. B*. – 2016. – V. 93. – P. 081102.
4. *Spiridis N.* Phonons in ultrathin oxide films – 2D to 3D transition in FeO on Pt(111) / N. Spiridis, M. Zając, Piekarczyk, A.I. Chumakov et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – V.115. – P. 186102.
5. *Bykova E.* Structural complexity of simple Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxide at high pressures and temperatures / E. Bykova, L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaja, M. Bykov et al. // *Nat. Commun.* – 2016 – V. 7.– P. 10661.

## Мёссбауэровское исследование модулированной магнитной структуры FeVO<sub>4</sub>

Соболев А.В.<sup>1</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>, Гапочка А.М.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Мацнев М.Е.<sup>1</sup>,  
Панкратов Д.А.<sup>1</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)  
ipresniakov@rambler.ru

### Mössbauer investigation of modulated magnetic structure of FeVO<sub>4</sub>

Sobolev A.V., Rusakov V.S., Gapochka A.M., Glazkova Ya.S., Matsnev M.E.,  
Pankratov D.A., Presniakov I.A.

We report new results of the <sup>57</sup>Fe Mössbauer study of powder sample FeVO<sub>4</sub> that demonstrates two successive magnetic phase transitions at  $T_{N1} \approx 22$  K, and  $T_{N2} \approx 15$  K. The analysis of the very complex Zeeman structure for magnetic hyperfine spectra is consistent with planar elliptical ( $T < T_{N2}$ ) and collinear ( $T_{N2} < T < T_{N1}$ ) modulated magnetic structures, that is in qualitative agreement with a previous neutron diffraction study. The obtained large anharmonicity parameter  $m_{4.8K} \approx 0.88$  of the helicoidal spin structure results from easy-axis anisotropy in the plane of the iron spin rotation. Analysis of the experimental spectra was carried out assuming an anisotropy of the magnetic hyperfine field  $H_{hf}$  at the <sup>57</sup>Fe nuclei when the Fe<sup>3+</sup> magnetic moment rotates with respect to the principal axis of the electric field gradient tensor.

Представлены результаты мёссбауэровского исследования мультиферроика FeVO<sub>4</sub>, проявляющего два магнитных фазовых перехода при  $T_{N1} \approx 22$  К и  $T_{N2} \approx 15$  К, первый из которых ( $T_{N1}$ ) связан с переходом парамагнетик-антиферромагнетик, а второй ( $T_{N2}$ ) – со сменой типа пространственной модуляции магнитной структуры ванадата. На основании данных расчета тензора ГЭП на ядрах <sup>57</sup>Fe проведена кристаллохимическая идентификация парциальных мёссбауэровских спектров, отвечающих различным кристаллографическим позициям катионов Fe<sup>3+</sup>. Спектры, измеренные в интервале  $T_{N2} < T < T_{N1}$ , анализируются в предположении об амплитудной модуляции магнитных моментов атомов железа. Результаты модельной расшифровки спектров при  $T < T_{N2}$  свидетельствуют о высокой ангармоничности ( $m_{4.8K} \approx 0.88$ ) геликоидальной магнитной структуры и анизотропии сверхтонкого магнитного поля ( $H_{hf}$ ) на ядрах <sup>57</sup>Fe, демонстрируя характерные особенности мультиферроиков второго рода. Полученные температурные зависимости параметров сверхтонких взаимодействий ядер <sup>57</sup>Fe анализируются в рамках модели молекулярного поля Вейсса и в предположении об орбитальном вкладе в магнитные моменты катионов железа.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант №14-03-00768.

## Мёссбауэровское исследование структурных модуляций в манганитах $AMn_7O_{12}$ ( $A = Ca, Sr, Cd, Pb$ )

Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Белик А.А.<sup>2</sup>, Соболев А.В.<sup>1</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский Государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Национальный Институт Наук о Материалах, Цукуба (Япония)

janglaz@bk.ru

### Mössbauer investigation of structural modulations

in  $AMn_7O_{12}$  ( $A = Ca, Sr, Cd, Pb$ ) manganites

Glazkova Ya.S., Belik A.A., Sobolev A.V., Presniakov I.A.

We discuss the results of Mössbauer study of the iron-doped manganites  $AMn_7O_{12}$  ( $A = Ca, Sr, Cd, Pb$ ) in temperature range of orbital ordering ( $T_{OO}$ ) where the structural modulation is observed. In accordance with modulations of quadrupole splittings  $\Delta$  driven by structural modulations we determined quadrupole splittings profiles versus temperature and its distributions at  $T < T_{OO}$ .

Для мультиферроика  $CaMn_7O_{12}$  характерна несоразмерная структурная модуляция вдоль гексагональной оси в области ниже температуры орбитального упорядочения  $T_{OO} = 250$  К. Подобные структурные сигналы в этой области температур, свидетельствующие о наличии модуляции дальнего порядка, были получены с использованием рентгеновской дифракции на синхротронном излучении и для других двойных манганитов –  $SrMn_7O_{12}$ ,  $CdMn_7O_{12}$  и  $PbMn_7O_{12}$ , недавно синтезированных и исследованных нами.

Для получения дополнительной информации о природе изменений локальной структуры, протекающих в манганитах  $AMn_7O_{12}$  ( $A = Ca, Sr, Cd, Pb$ ) в области структурного фазового перехода, связанного с орбитальным упорядочением, были проведены детальные мёссбауэровские исследования допированных атомами  $^{57}Fe$  образцов манганитов в широком диапазоне температур. Данные полуэмпирических расчетов решёточных вкладов в градиент электрического поля (ГЭП) на ядрах  $^{57}Fe$  позволили, в частности, объяснить наблюдаемые высокие значения квадрупольных расщеплений в мёссбауэровских спектрах (МС), измеренных в области предполагаемых температур орбитального упорядочения. Параметры ГЭП были определены в рамках кристаллической решётки с модуляцией атомных позиций. В соответствии с изменениями значений квадрупольных расщеплений  $\Delta$ , вызванными структурной модуляцией, мы построили зависимости квадрупольных расщеплений от температур измерения и их распределения при  $T < T_{OO}$ . Средние значения  $\Delta$  в МС, измеренных в диапазоне температур от 90 К до 300 К, оказались значительно выше, чем рассчитанные теоретически для немодулированной структуры. Оцененные из МС значения  $T_{OO}$  хорошо согласуются с результатами физических методов исследования.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант № 14-03-00768.

## Localized and itinerant electron ferromagnetism in two-dimensional organo-metallic networks

**Ovanesyan N. S.<sup>1</sup>, Nikitina Z. K.<sup>1</sup>, Shilov G. V.<sup>1</sup>, Makhaev V. D.<sup>1</sup>, Li Ya.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Problems of Chemical Physics, 1, Akad. Semenov av., 142432, Chernogolovka (Russia)*

<sup>2</sup>*Institut Parisien de Chimie Moléculaire, 4 place Jussieu, 75252, Paris Cedex 05 (France)*

kolya44@mail.ru

Metal compounds containing (DHBQ)<sup>2-</sup>, chloranilate (ClAn)<sup>2-</sup> etc., as bis-bidentate ligands having delocalized  $\pi$ -system are attractive for constructing new molecule-based magnets. Recently, both bimetallic (NBu<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[MFe(ClAn)<sub>3</sub>],  $M = \text{Mn-Cu}$ , and monometallic [(H<sub>3</sub>O)<sub>2</sub>(phz)<sub>3</sub>] [M<sub>2</sub>(ClAn)<sub>3</sub>],  $M = \text{Mn, Fe}$ , compounds with extended networks were synthesized [1, 2]. Here we report a characterization of a new family of monometallic compounds with TBA counter cation, (NBu<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[M<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>Cl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>],  $M = \text{Mn, Fe, Cu}$ . They possess a stack of [M<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>Cl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]<sup>2-</sup>, highly distorted honeycomb layers, separated by a double (NBu<sub>4</sub>)<sup>+</sup> cationic layer. Exchange interaction of Cu<sup>2+</sup>/Mn<sup>2+</sup> localized moments via (ClAn)<sup>2-</sup> bridge reveals the expected antiferromagnetic long-range ordering. For Fe-derivative, contrary to the expected Fe<sup>2+</sup> charge state, the Mössbauer spectroscopy reveal delocalized mixed-valent Fe<sup>2.5+</sup> state related to a valence tautomeric transition Fe<sup>2+</sup>(ClAn)<sup>2-</sup> → Fe<sup>3+</sup>(ClAn)<sup>3-</sup>. Electron delocalization leads to a ferromagnetic long-range ordering of iron magnetic moments ( $T_C = 12.5$  K) following the double exchange (electron transfer) mechanism. Ammonium cation replacement of NPh<sub>4</sub> for NBu<sub>4</sub> does not affect the ferromagnetic transition temperature, while the bromanilato substituent, (NBu<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[Fe<sub>2</sub>(BrAn)<sub>3</sub>], leads to the lowering of  $T_C$  to 8 K.

In contrast to many molecular magnets usually belonging to the category of insulators the electronic exchange between the metal centers favors a semiconducting behavior with low activation energy. Coexistence of ferromagnetic ordering and electric conductivity within the same sublattice are in accord to the double exchange mechanism for mixed-valence anilato-bridged compounds.

### REFERENCES

1. Nikitina Z.K. Bimetallic chloranilate complexes (R<sub>4</sub>E)[M<sup>II</sup>Fe<sup>III</sup>(C<sub>6</sub>O<sub>4</sub>C<sub>12</sub>)<sub>3</sub>](R<sub>4</sub>E = Bu<sub>4</sub>N, Ph<sub>4</sub>P; M<sup>II</sup> = Mn, Fe, Co, Ni, Cu): Synthesis, characteristics, and magnetic properties / Z. K. Nikitina, N. S. Ovanesyan, G. V. Shilov, V. D. Makhaev, S. M. Aldoshin // Dokl. Chem. – 2011. – V. 437. – P. 129–132.
2. Shilov G.V. Phenazineoxonium chloranilatomanganate and chloranilatoferrate: synthesis, structure, magnetic properties and Mössbauer spectra / G. V. Shilov, Z. K. Nikitina, N. S. Ovanesyan, V. D. Makhaev, S. M. Aldoshin // Russ. Chem. Bull. – 2011. – V. 60. – P. 1209-1219.



# Локальный нагрев среды в нанокрестности ядра $^{57}\text{Co}$ , превратившегося в ядро $^{57}\text{Fe}$ в результате процесса E-захвата

**Степанов С.В.<sup>1-3</sup>, Бяков В.М.<sup>1,3,4</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>1</sup>, Куликов Л.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>ГНЦ РФ ИТЭФ, Москва (Россия)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва (Россия)

<sup>4</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва (Россия)

stepanov@itep.ru

## Local heating in the nanovicinity of the $^{57}\text{Co}$ nucleus, transformed into $^{57}\text{Fe}$ as a result of the E-capture

Stepanov S.V., Byakov V.M., Perfiliev Yu.D., Kulikov L.A.

We have estimated a local heating which takes place owing to the ionization energy losses at the terminal part of a fast positron track and at nano-vicinity of the  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer nuclei in case of the emission Mössbauer spectroscopy. It is shown that in experiments close to the melting point one may expect local melting near the probe species.

В ядерно-физических методах исследования конденсированных сред (таких, как позитронная и мюонная спектроскопии, магнитный резонанс на поляризованных радиоактивных ядрах, метод возмущенных гамма-корреляций) влияние относительно большого локального энерговыделения в месте расположения частицы-зонда (позитрона, мюона, имплантированного ядра) может оказаться весьма существенным. Эта особенность имеет место и в эмиссионном варианте мёссбауэровской спектроскопии (ЭМС), когда в изучаемую твердую среду предварительно вводятся в ничтожно малой концентрации радиоактивные ядра, например,  $^{57}\text{Co}$ , которые после электронного захвата превращаются в возбужденные мёссбауэровские ядра железа,  $^{57}\text{Fe}^*$ . В зависимости от природы зондирующей частицы и характера ее введения в изучаемую среду вокруг этой частицы могут образоваться либо ион-электронные пары, либо происходить каскады атомных смещений. Тем не менее, и в том и другом случае эти процессы сопровождаются заметным локальным повышением температуры среды.

Рассмотрен процесс образования Оже-блоба (наноразмерного скопления из двух-трех сотен ион-электронных пар) вокруг радиоактивного атома  $^{57}\text{Co}$ , претерпевшего E-захват с последующим испусканием дочерним атомом  $^{57}\text{Fe}$  каскада Оже-электронов. Обсуждается эффект локального повышения температуры в Оже-блобе, обусловленный энерговыделением в ходе ионизационного торможения Оже-электронов и порожденных ими вторичных электронов. Эффект предплавления может проявиться в исчезновении безотдачной доли гамма-излучения мёссбауэровских ядер.

## Возможности применения мёссбаэровской спектроскопии в материаловедческих исследованиях

Бурханов Г.С.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,  
Москва (Россия)  
genburkh@imet.ac.ru*

### Possibilities of application of Mössbauer spectroscopy in materials science research

Burkhanov G.S.

Possibilities of Mössbauer spectroscopy for the study of new superconducting compounds, such as iron selenides, and Nd-Fe-B-based magnetic materials are discussed.

На сегодняшний день с помощью эффекта мёссбаэра наиболее активно исследуются химические соединения, в состав которых входят изотопы с  $^{57}\text{Fe}$  и  $^{119}\text{Sn}$ . Круг используемых изотопов постепенно расширяется:  $^{61}\text{Ni}$ ,  $^{67}\text{Zn}$ ,  $^{181}\text{Ta}$ ,  $^{187}\text{W}$ ,  $^{191}\text{Ir}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{151}\text{Eu}$ ,  $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{166}\text{Er}$ ,  $^{169}\text{Tm}$ . Особый интерес начинает проявляться к изотопам редкоземельных и платиновых металлов. Металлические фазы с участием этих металлов отличаются проявлением аномальных эффектов, особенно при низком содержании примесей, которые часто оказывают маскирующее действие. Эффект Мёссбаэра открывает большие возможности для исследования природы аномальных фаз, магнитных и электрических полей около излучателей-ядер, магнитной структуры и магнитных свойств соединений и сплавов, особенностей химической связи и динамики кристаллической решетки этих фаз.

Весьма перспективны с этой точки зрения новые сверхпроводники на основе селенидов железа ( $\text{FeSe}$ ), которые обладают слоистой кристаллической структурой. В промежутки между слоями могут быть интеркалированы атомы щелочных металлов, что приводит к росту критической температуры от 6 до 40 К. В зависимости от природы фазы магнетизм может не только не подавлять, но и улучшать сверхпроводимость.

Метод мёссбаэровской спектроскопии может быть использован при исследовании структурных особенностей высококоэрцитивных магнитных материалов, магнитострикционных эффектов. Большое внимание привлекают редкоземельные фазы Лавеса с гигантской магнитострикцией, в которых спин-переориентационный переход сопровождается резким изменением широкого комплекса свойств.

## Structural, magnetic properties and Mössbauer spectra of $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_x\text{Al}_x\text{Fe}_{12-2x}\text{O}_{19}$ ( $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ and 1)

Singh C.<sup>1</sup>, Zaki H. M.<sup>2,3</sup>, Abdel-Latif I. A.<sup>4,5</sup>, Singh J.<sup>6</sup>,  
Narang S. B.<sup>7</sup>, Joshi R.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Electronics and Communication Engineering, Rayat Bahra Institute of Engineering and Nanotechnology Hoshiarpur (Punjab India)*

<sup>2</sup>*Department of Physics, Zagazig University, Zagazig (Egypt)*

<sup>3</sup>*Department of Physics, King Abdul Aziz, Jeddah (Saudi Arabia)*

<sup>4</sup>*Department of Physics, Najran University Najran (Saudi Arabia)*

<sup>5</sup>*Reactor Physics Department, NRC, Atomic Energy Authority, Abou Zabaal, Cairo (Egypt)*

<sup>6</sup>*Department of Electronics and Communication Engineering, Yadavindra college of Engineering, Punjabi University Guru Kashi Campus, Talwandi Sabo (Punjab India)*

ihab\_abdellatif@yahoo.co.uk

The structural, magnetic and Mössbauer spectroscopy analysis of barium-strontium hexaferrites;  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_x\text{Al}_x\text{Fe}_{12-2x}\text{O}_{19}$  ( $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  and 1) prepared using conventional solid state method is presented in this work. There is variation in lattice constants with substitution that is an indication to we achieved the substitutions in the crystallographic sites. It also implies that easy magnetized  $c$ -axis undergoes more contraction than  $a$ -axis with  $\text{Co}^{2+}$  and  $\text{Al}^{3+}$  ions substitution. Hysteresis loops showed, in our case, that all the samples exhibit sharp increase in magnetization at low applied field followed by a slow variation at high field; this is a typical behaviour of multi-domain particles. Our results showed maximum  $BH_{\text{max}}$  in undoped  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$  ferrite ( $x = 0.0$ ) due to highest coercivity. Thus, composite,  $x = 0.0$ , stores more energy than composite Co–Al substituted in Ba–Sr ferrite compositions. The same reason applies for the highest remanence magnetization ( $M_r$ ) or retentivity of 7.48 emu/gm in undoped composition  $x = 0.0$  and it decreases with substitution of  $\text{Co}^{2+}$  and  $\text{Al}^{3+}$  ions. Five magnetic sextets, deduced from fitting of Mössbauer spectra, are corresponding to five crystallographic position.

## Мёссбауэровское исследование локальных кристаллографической и магнитной структур оксофосфата железа (III) $\text{Fe}_3\text{PO}_7$

Акуленко А.А.<sup>1</sup>, Соболев А.В.<sup>1</sup>, Панкратов Д.А.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)  
alena.akula3@mail.ru

### Mössbauer study of the local crystallographic and magnetic structures of iron (III) oxophosphate $\text{Fe}_3\text{PO}_7$

Akulenko A.A., Sobolev A.V., Pankratov D.A., Glazkova Ya.S., Presniakov I.A.

We report new results of the Mössbauer study of the iron (III) oxophosphate  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$  which demonstrates unusual non-collinear magnetic structure. Mössbauer spectrum in paramagnetic temperature region was compared with local crystallographic structure of  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$ , in particular with parameters of electric field gradient on  $^{57}\text{Fe}$  nuclei. At  $T < T_N$  Mössbauer spectra were discussed in terms of non-collinear helical and conical magnetic structures of  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$ .

В работе представлены результаты мёссбауэровского исследования оксофосфата железа(III)  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$ , обладающего неколлинеарной магнитной структурой.  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$  является не только перспективным материалом для использования в литий-ионных аккумуляторах, но и привлекательным объектом для исследования фундаментальных магнитных свойств.

Мёссбауэровская диагностика позволила охарактеризовать валентное состояние железа, а также локальные кристаллографическую и магнитную структуры данного фосфата. Мёссбауэровский спектр  $^{57}\text{Fe}$  поликристаллического образца  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$ , измеренный в парамагнитной области температур, представляет собой квадрупольный дублет, который можно отнести к катионам  $\text{Fe}^{3+}$  в высокоспиновом состоянии в тригональной бипирамиде из анионов кислорода, что соответствует кристаллической структуре  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$ . Экспериментальное значение квадрупольного расщепления находится в хорошем согласии с рассчитанными в рамках ионной модели параметрами градиента электрического поля (ГЭП) на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ . Полученная информация о взаимной ориентации компонент ГЭП была использована при интерпретации спектров  $^{57}\text{Fe}$  в магнитоупорядоченной области температур.

Мёссбауэровские спектры  $\text{Fe}_3\text{PO}_7$  при температурах измерения ниже  $T_N$  представляют собой сложную асимметричную уширенную магнитную сверхтонкую структуру, которая была интерпретирована в рамках неколлинеарных геликоидальной и конусообразной магнитной структур соединения. Представлены и проанализированы температурные зависимости сверхтонких магнитных полей.

## Исследование магнитных фазовых превращений в частицах селенида железа, полученных методом высокотемпературной твердофазной реакции

**Балуян Т.Г., Новакова А.А.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет,  
Кафедра физики твердого тела, Москва (Россия)*

tarinax@yandex.ru

### Investigation of magnetic phase transition in the solid state reaction-obtained iron selenide particles

Baluyan T.G., Novakova A.A.

In this work  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$  particles were investigated by means of X-ray diffraction, electron microscopy and Mössbauer spectroscopy. The structure of the particles was discovered to be the 3C superstructure, the size of the particles was in the interval on 2–50  $\mu\text{m}$ . Analysis of Mössbauer spectra show that the spin transition in this system occurs smoothly in the temperature range from 120 to 150 K and behaves in a different way for different sublattices.

В данной работе методами электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и мёссбауэровской спектроскопии исследовался образец  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$  с 3С сверхструктурой, полученный методом высокотемпературной твердофазной реакции с последующей закалкой.

Электронная микроскопия показала распределение частиц по размерам в широком интервале от 2 до 50 мкм. Мёссбауэровские спектры образца снимались в интервале температур от 80 до 297 К, при этом при комнатной температуре был также получен спектр образца во внешнем магнитном поле величиной 1 Тл.

Математическая обработка и анализ мессбауэровских спектров показали наличие трех подрешеток в структуре  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$ , соответствующих различным положениям вакансий в кристаллической решетке образца. Анализ температурных зависимостей эффективного магнитного поля показал, что переориентация спинов, описываемая в [1, 2], происходит не при температуре 125 К, а в интервале температур от 120 до 150 К. При этом для А подрешетки наблюдается сначала увеличение, а затем уменьшение эффективного магнитного поля на ядрах железа при температурах 150 К и 125 К соответственно, в то время как С подрешетка показывает только скачкообразное увеличение поля при 130 К.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Boumford C.* Magnetic properties of the iron selenide  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$  / C. Boumford, A.H. Morrish // *Phys.stat.sol. (a)*. – 1974. – V. 22. – №. 2. – P. 435-444.
2. *Ok H.N.* Mössbauer study of “3c” superstructure of the ferrimagnetic  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$  / H.N. Ok, K.S. Baek, E.C. Kim // *Solid state commun.* – 1993. – V. 87. – №. 12. – P. 1169-1172.

## Температурные исследования мультиферроика $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$ методами мёссбауэровской спектроскопии

Русаков В.С.<sup>1</sup>, Покатилов В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>2</sup>, Белик А.А.<sup>3</sup>, Мацнев М.Е.<sup>1</sup>,  
Гапочка А.М.<sup>1</sup>, Кулаков К.В.<sup>1</sup>, Лукьянова Е.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>3</sup>International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science,  
Tsukuba (Japan)

al-gap@physics.msu.ru

## Temperature study of $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$ multiferroic by Mössbauer spectroscopy methods

Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A., Matsnev M.E.,  
Gapochka A.M., Kulakov K.V., Luk'yanova E.N.

The results of the Mössbauer studies of  $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$  multiferroic in a wide temperature range including the temperature of magnetic phase transition have been presented. The Mössbauer spectra have been analyzed in terms of the model of an incommensurate anharmonic spatial spin-modulated structure (SSMS) of cycloid type. Information about the effect of the substitution of Mn atoms for Fe atoms on the SSMS and hyperfine interaction of  $^{57}\text{Fe}$  nuclei has been obtained.

Методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  исследована пространственная спин-модулированная структура (ПСМС), а также электрические и магнитные сверхтонкие взаимодействия (СТВ) в мультиферроике  $\text{BiFe}_{0.90}\text{Mn}_{0.10}\text{O}_3$ . Установлено, что примесные атомы Mn распределены по позициям атомов Fe в структуре  $\text{BiFeO}_3$  случайным образом. При температурах ниже температуры магнитного упорядочения образуется несоразмерная ангармоническая ПСМС циклоидного типа, в которой участвуют атомы железа с различным катионным окружением. При всех температурах существования ПСМС с замещением атомов Fe на атомы Mn параметр ангармонизма увеличивается. В рамках модели несоразмерной ангармонической ПСМС циклоидного типа получены температурные зависимости изотропного и анизотропного вкладов в сверхтонкое магнитное поле. Анизотропный вклад с повышением температуры сначала (с  $\sim 5$  К) слабо возрастает, а затем (после  $\sim 300$  К) убывает, стремясь к нулю при  $\sim 565$  К. Температурные зависимости параметра ангармонизма ПСМС и параметров СТВ указывают на то, что при  $\sim 325$  К происходит переход от ПСМС типа «легкая ось» к ПСМС типа «легкая плоскость». Замещение атома Fe на атом Mn в ближайшем катионном окружении атома Fe приводит к уменьшению изотропного вклада в сверхтонкое магнитное поле, при этом не приводит к заметному изменению других параметров СТВ: анизотропного вклада, сдвига и квадрупольного смещения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01109а) и Министерства образования и науки РФ (госзадание № 2014/112, проект 1066).

## Парамагнитная магнитострикция в тербии

Годовиков С.К.

НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

godov@srd.sinp.msu.ru

### Magnetostriction of Tb in paramagnetic state

Godovikov S.K.

This study is a part of a search for various manifestations of self-organization in crystals. Long-period oscillations were observed for site populations of Sn atoms in Tb single crystal.

Найдено принципиально новое явление в ряду редкоземельных металлов (монокристаллический тербий): магнитострикция в парамагнитном состоянии, которая инициирует автоколебательный процесс перемещения атомов примеси (Sn) по структуре. Причина колебаний – наведенное, в данном случае магнитострикцией, локальное давление [1]. Период колебаний ~ 11 дней, длительность ~ 3 месяца.

Измерения проведены при комнатной температуре;  $T_N=230$  К. Магнитное поле прикладывалось вдоль оси легкого намагничивания в течение 1 недели до 97 дня (1 кЭ) и в течение 11 дней до 281 дня (8 кЭ), что отмечено на рис.1. Исходные параметры мёссбауэровского спектра образца монокристаллического Tb, легированного 0.5 ат. % Sn, обогащенного  $^{119}\text{Sn}$ , сведены в таблицу 1. Зависимость отношения заселенностей положений (A2/A1) примесного атома Sn в г.п.у. структуре Tb от времени представлена на рис. 1. Природа этих двух различных положений допускает различные толкования и ждет дальнейших исследований.

Таблица 1. Параметры мёссбауэровского спектра образца монокристалла Tb

	$\delta_{\text{Sn}}$ , мм/с	$\Gamma$ , мм/с
Синглет 1	$1.804 \pm 0.038$	$0.655 \pm 0.044$
Синглет 2	$2.222 \pm 0.025$	

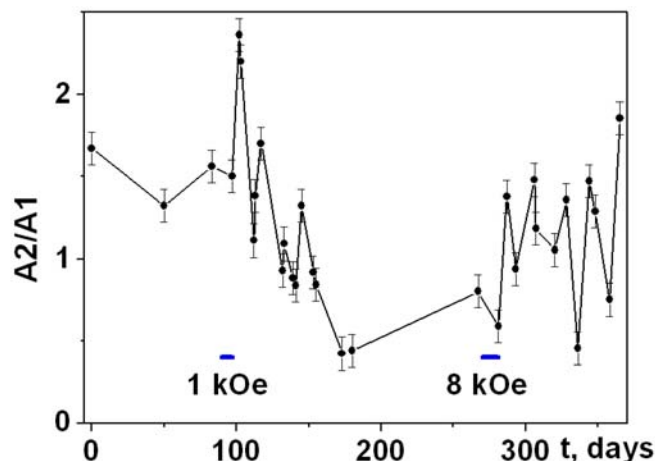


Рис. 1. Зависимость отношения заселенностей положений (A2/A1) примесного атома Sn в г.п.у. структуре Tb от времени

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Godovikov S.K. The formation mechanism of a time order in the activated BiFeO<sub>3</sub> multiferroic / S.K. Godovikov, S.M. Nikitin // Solid State Commun. – 2015. – V. 219. – P. 28–32.

## Mössbauer study of polymer composites with spatially oriented ferromagnetic particles of different composition and shape

Kiseleva T.Yu.<sup>1</sup>, Kabanov V.M.<sup>1</sup>, Zholudev S.I.<sup>2</sup>, Novakova A.A.<sup>1</sup>, Markov G.P.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Moscow M.V.Lomonosov State University, Faculty of Physics. Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*Technological Institute for Superhard and Novel Carbon materials, Troitsk (Russia)*

<sup>3</sup>*Schmidt Institute of the Physics of the Earth, RAS, Moscow (Russia)*

vm.kabanov@physics.msu.ru

Elastic metal-filled polymer composite materials combining the elasticity matrix and filler functionality show special significance in the modern technologies for the purpose of formation of the protective coating, the magnetic sensor technology, positioning systems. In addition to the concentration of the filler particles, their spatial orderly arrangement in the polymer matrix, specific properties of the particles such as shape anisotropy, size and phase composition, interfacial and interparticle interactions plays a significant role in the formation of the achieved functional properties. Our earlier studies [1, 2] have shown that the use of particles of magnetostrictive phase composition in combination with shape anisotropy and its directional orientation in the polyurethane matrix allows to form magnetically anisotropic elastic material showing significant magnetodeformational effect. In this paper we analyzed the influence of the particle's form factor and size on the achieved magnetomechanical effects and its anisotropy. Composites were formed on the base of the polyurethane filled with spherical and platelet iron- containing particles that were spatially oriented by external magnetic field during polymerization in the chains inside polymer matrix. In order to identify the structural and morphological factors that affect the anisotropic effects, we analyzed the interaction of particles with a polymer matrix and the effects of the magnetic anisotropy using Mössbauer spectroscopy in the geometry on the absorption and with registration of conversion electrons by CEMS. Magnetic texture along the particle's chains in which the particles are located along their anisotropy axis has been established. The different anisotropic magnetic and mechanical effects of elastic modulus, viscosity and saturation magnetization have been revealed.

### REFERENCES

1. *Zholudev S.I.* Mössbauer study of new functional metal/polymer nanocomposites with spatially oriented FeGa particles / S.I. Zholudev, T.Y. Kiseleva // *Hyperfine Interactions.* – 2014. – V. 226. – №. 1-3. – P. 375-382.
2. *Kiseleva T.* The enhanced magnetodeformational effect in Galfenol/polyurethane nanocomposites by the arrangement of particle chains / T. Kiseleva, S. Zholudev, A. Novakova, T. Grigoryeva // *Composite Structures.* – 2016. – V. 138. – P. 12-16.



## Low temperature Mössbauer study of Fe<sub>1.05</sub>Te

**Kiiamov A.G.<sup>1</sup>, Vagizov F.G.<sup>1</sup>, Tagirov L.R.<sup>1</sup>, Lysogorskiy Y.V.<sup>1</sup>, Tsurkan V.<sup>2,3</sup>, Loidl A.<sup>3</sup>,  
Tayurskii D. A.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Institute for Applied Physics, Academy of Sciences of Moldova, MD-2028, Chisinau (Moldova)*

<sup>3</sup>*Experimental Physics V, Centre for Electronic Correlations and Magnetism,*

*University of Augsburg, Augsburg (Germany)*

*AiratPhD@gmail.com*

FeTe is actively investigated after discovering superconductivity in FeSe which has similar layered crystal structure [1]. FeTe shows antiferromagnetic order at low temperatures [2]. It is well known that FeTe always grows with excess iron atoms [3] which affect the electronic properties [4] and complicate magnetic order of Fe<sub>1+y</sub>Te compounds [2]. Mössbauer measurements at low temperatures (LT) were carried out in order to investigate the features of magnetic ordering in Fe<sub>1.05</sub>Te compound which contain excess iron atoms. Mössbauer spectrum collected at 4.2 K has complex shape with a number of lines which could be attributed to several magnetic sextets. The minimal number of sextets which allows us to describe accurately the LT spectrum was found equal to four (with following partial sub-spectra areas distribution: 0.46, 0.31, 0.17, 0.06). The occurrence of the four contributions into the LT spectrum also could be a signature of intrinsic property of the Fe<sub>1+y</sub>Te compound. Existence of the four magnetically non-equivalent iron positions in the lattice is confirmed by our *ab initio* calculation of the Mössbauer spectra parameters.

The support by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the state assignment in the sphere of scientific activities and by the Program of Competitive Growth of Kazan Federal University is gratefully acknowledged.

### REFERENCES

1. *Mizuguchi Y.* FeTe as a candidate material for new iron-based superconductor / Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda, T. Yamaguchi, Y. Takano // *Physica C: Superconductivity*. – 2009. – V. 469. – №. 15. – P. 1027-1029.
2. *Enayat M.* Real-space imaging of the atomic-scale magnetic structure of Fe<sub>1+y</sub>Te / M. Enayat, Z. Sun, U.R. Singh, R. Aluru, S. Schmaus, A. Yaresko, J. Deisenhofer // *Science*. – 2014. – V. 345. – №. 6197. – P. 653-656.
3. *Gronvold F.* Phase and structural relations in the system iron tellurium / F. Gronvold, H. Haraldsen, J. Vihovde // *Acta Chem. Scand.* – 1954. – V. 8. – P. 10.
4. *Zhang L.* Density functional study of excess Fe in Fe<sub>1+x</sub>Te: Magnetism and doping / L. Zhang, D. J. Singh, M. H. Du // *Physical Review B*. – 2009. – V. 79. – №. 1. – P. 012506.

## Study of cation distribution in single crystals Mn<sub>2-x</sub>Fe<sub>x</sub>BO<sub>4</sub> ( $x = 0.34, 0.53, 0.72$ ) through Mössbauer spectroscopy

**Knyazev Yu.V.<sup>1,2</sup>, Kazak N.V.<sup>2</sup>, Bayukov O.A.<sup>2</sup>, Bezmaternykh L.N.<sup>2</sup>, Solovyov L.A.<sup>3</sup>,  
Platunov M.S.<sup>2</sup>, Ovchinnikov S.G.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Siberian Federal University, Krasnoyarsk (Russia)*

<sup>2</sup>*Kirensky Institute of Physics, SB of RAS, Krasnoyarsk (Russia)*

<sup>3</sup>*Institute of Chemistry and Chemical Technology, SB of RAS, Krasnoyarsk (Russia)*

yuvknyazev@mail.ru

Single crystals Mn<sub>2-x</sub>Fe<sub>x</sub>BO<sub>4</sub> ( $x = 0.34, 0.53, 0.72$ ) with warwickite structure have been synthesized by flux-method [1] for the first time. The obtained lattice parameters from X-ray diffraction are agreed with that for MnFeBO<sub>4</sub> [2]. Scant information about ion distribution and valent state supplemented by Mössbauer spectroscopy at room temperature. Each of all spectra can be represented by the superposition of four Fe<sup>3+</sup> doublets (*D1–D4*) that indicates different magnetic environment of Fe<sup>3+</sup> ions (Table 1).

*Table 1.* Hyperfine parameters obtained from RT Mössbauer spectra of Mn<sub>2-x</sub>Fe<sub>x</sub>BO<sub>4</sub>

$x$	Doublet	$IS(\pm 0.01)$ , mm/s	$QS, (\pm 0.02)$ , mm/s	$W, (\pm 0.02)$ , mm/s	$A, (\pm 2.0)$ , %	Position
0.34	<i>D1</i>	0.395	1.26	0.314	35.2	M1
	<i>D2</i>	0.401	1.56	0.297	20.1	M1
	<i>D3</i>	0.411	0.54	0.304	16.2	M2
	<i>D4</i>	0.401	0.92	0.349	28.3	M2
0.53	<i>D1</i>	0.399	1.11	0.329	31.7	M1
	<i>D2</i>	0.398	1.42	0.344	17.3	M1
	<i>D3</i>	0.399	0.51	0.304	18.9	M2
	<i>D4</i>	0.401	0.82	0.323	32.1	M2
0.72	<i>D1</i>	0.402	1.02	0.282	32.1	M1
	<i>D2</i>	0.404	1.31	0.291	14.2	M1
	<i>D3</i>	0.411	0.55	0.301	20.2	M2
	<i>D4</i>	0.405	0.76	0.292	33.5	M2

This work has been financed by the Council for Grants of the President of the RF (SP-938.2015.5), the RFBR (№ 16-32-60049 mol\_a\_dk, № 16-32-00206 mol\_a), SB RAS program № II.2P contract 0358-2015-0005 and by “UMNIK” program.

### REFERENCES

1. *Utzolino A.* Zur Synthese und Kristallstruktur von manganhaltigen Boratoxiden: MnFe(BO<sub>3</sub>)O und MnAl<sub>0.5</sub>Y<sub>0.5</sub>(BO<sub>3</sub>)O / Synthesis and Crystal Structure of Manganese Borate Oxides: MnFe(BO<sub>3</sub>)O and MnAl<sub>0.5</sub>Y<sub>0.5</sub>(BO<sub>3</sub>)O / A. Utzolino, K. Bluhm // Zeitschrift für Naturforschung B. – 1995. – V. 50. – №. 8. – P. 1146-1150.
2. *Kazak N.V.* Crystal and local atomic structure of MgFeBO<sub>4</sub>, Mg<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>FeBO<sub>4</sub> and CoFeBO<sub>4</sub>: Effects of Co substitution / N.V. Kazak et al. // Physica Status Solidi B. – 2015. – V. 252. – P. 2245.

## ***Ab-initio* study of electronic correlations and disproportionation in the $x=2/3$ phase of sodium cobaltates**

**Lysogorskiy Y.V., Krivenko S.A., Nedopekin O.V. and Tayurskii D.A.**

*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

s.a.krivenko@mail.ru

Recent  $^{59}\text{Co}$  nuclear magnetic resonance (NMR) measurements have detected an unusual metallic state with a regular arrangement of the  $3d(\text{Co})$  electrons in the triangular cobalt lattice of the  $\text{CoO}_2$  slabs of the lamellar cobaltate  $\text{Na}_{2/3}\text{CoO}_2$  [1,2]. Namely, at  $T < 400$  K the lattice disproportionates into the spin-less sites  $\text{Co1}^{3+}[3d(t^6_{2g})]$  with the occupied electronic  $t_{2g}$  cubic levels and the remaining magnetic sites  $\text{Co2}^{3.44+}$  which form the kagome sub-lattice, containing the itinerant holes  $\text{Co}^{4+}[3d(t^5_{2g})]$ . Experimentally, a transition to this phase concurs with the ordering of  $\text{Na}^+$  cations in the single-ion Na1 and six-ion Na2 positions within the sodium planes, alternating with the  $\text{CoO}_2$  slabs in the layered material [3].

In the present work, we have theoretically studied a formation of this unusual metallic state of the Co planes. In particular, we have investigated an interplay between mutual correlations of the itinerant  $d$  electrons and their coupling to the sodium superstructure. To this end, the electronic states have been calculated *ab-initio* for the system with an exact crystallographic cell containing 264 atoms [1] in a dependence on the energy  $U$  of the Coulomb repulsion within the  $3d$  shells, employing the GGA+ $U$  approximation. We have found that the ground state possesses a crossover from a uniform to the spin/charge non-uniform regime at  $U > U_c = 2$  eV. At the realistic  $U = 5$  eV the disproportionate metallic state appears, with the completely suppressed magnetism of the Co1 sites and the extended spin-active holes hopping within the magnetic kagome lattice Co2. We have established concurrent transitions of  $\text{Co2}^{3+}$  ions to virtual higher-spin  $S = 1$  states  $t^5_{2g}e_g$ , which enhance correlations in the  $d$ -shells due to the Hund's coupling and substantially reduce the energy of the non-uniform state of the metal. Both the calculated magnetic/charge structure of the Co lattice and the magnitudes of spin moments are in conformity with those observed in the NMR experiments [1,2].

### REFERENCES

1. Alloul H. Na ordering imprints a metallic kagome lattice onto the Co planes of  $\text{Na}_{2/3}\text{CoO}_2$  / H. Alloul, I.R. Mukhamedshin, T.A. Platova, A.V. Dooglav // *Europhysics Letters*. – 2009. – V. 85. – P. 47006-p1–47006-p6.
2. Mukhamedshin I.R.  $^{59}\text{Co}$  NMR evidence for charge and orbital order in the kagome-like structure of  $\text{Na}_{2/3}\text{CoO}_2$  / I.R. Mukhamedshin and H. Alloul // *Physical Review B*. – 2011. – V. 84. – P. 155112-1–155112-18.
3. Foo M.L. Charge ordering, commensurability, and metallicity in the phase diagram of the layered  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  / M.L. Foo, Y. Wang, S. Watauchi, H.W. Zandbergen, T. He, R.J. Cava, and N.P. Ong // *Physical Review Letters*. – 2004. – V. 92. – P. 247001-1–247001-4.

## Мёссбауэровская спектроскопия включений интерметаллидов в циркониевых сплавах

Кириченко В.Г.

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков (Украина)*  
val\_kir48@mail.ru

### Mössbauer spectroscopy of intermetallic phases inclusions in zirconium alloys

Kirichenko V.G.

In work the interrelation of processes of growth of inclusions of intermetallic phases and their surface segregation in binary and threefold alloys on the basis of zirconium is found. We determine the diffusion coefficient of iron atoms in intermetallic inclusions as  $D_{\text{Fe}} = 3.5 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ , which is an order of magnitude below the diffusion coefficient of Fe in alpha- zirconium.

Обнаруженная приповерхностная сегрегация интерметаллических включений в сплавах циркония позволяет на микроскопическом уровне понять и изучить роль выделений, механизмы и пути повышения радиационной и коррозионной стойкости циркониевых сплавов. Исследование приповерхностных слоев сплавов циркония необходимо для целенаправленного выбора типа и вида обработки поверхности сплавов циркония.

Для проведения исследования были изготовлены сплавы: Zr – 1.03 ат. % Fe; Zr – 0.51 ат. % Fe; Zr – 0.51 ат. % Fe – M (M = Nb, Sn, Ta). Использовалась мёссбауэровская спектроскопия на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в геометрии обратного рассеяния с регистрацией электронов внутренней конверсии (МСКЭ). Анализ поверхности образцов производили с помощью спектрометра «Camebax MBX 268» и сканирующих электронных микроскопов JEOL JSM-840 и «Quanta 3D».

Обнаружено увеличение поверхностной концентрации атомов железа в составе включений интерметаллических фаз, которое коррелирует с ростом размеров включений при термическом отжиге сплавов. Увеличение поверхностной концентрации атомов железа начинается с температуры отжига 900 К при размерах включений около 45 нм.

В рамках простой модели асимметричного роста интерметаллических включений, приводящего к их миграции и взаимодействию с границами зерен, определен коэффициент диффузии атомов железа в интерметаллическом включении  $D_{\text{Fe}} = 3.5 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{c}$ , что ниже, чем коэффициент диффузии атомов Fe в альфа - цирконии ( $2.5 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{c}$ ).

## Structure of surface nanolayers of yttrium iron garnet films

**Kirichenko V.G., Kovalenko O.V.**

*Karazin Kharkiv National University, Kharkiv (Ukraine)*

val\_kir48@mail.ru

The aim of this work was to study the elemental composition of the transition layers in yttrium iron garnet (YIG) films on substrates of gadolinium gallium garnet (GGG), modeling and analysis of the effect of irradiation by helium ions on thin-film structures.

YIG films was obtained by the method of ion-beam sputtering of YIG target enriched to 25%  $^{57}\text{Fe}$  isotope and by pulsed laser deposition on the substrate as GGG (111) orientation. Elemental analysis of subsurface layer YIG films produced with the use of spectrometry of Rutherford backscattering (SRBS) using proton beams ( $E = 1$  MeV) or  $\alpha$ -particles ( $E = 2.2$  MeV). Phase composition of the surface layers of YIG thin films was determined by Mössbauer spectroscopy on  $^{57}\text{Fe}$  nuclei in backscattering geometry of detection of internal conversion electrons (CEMS). Irradiation of thin films carried out by  $\text{He}^+$  ions with an energy of 26 keV.

Analysis of the Mössbauer doublet scattering spectra of three groups prepared thin-film structures (option 1 –  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  ion-beam sputtering target  $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3$  and deposition on a substrate GGG, option 2 – pulsed laser deposition of  $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3$  on the substrate GGG, option 3 – ion-beam deposition of  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  on GGG substrate gives different results. Option 1 is characterized by the scattering spectra with the mean values of the isomer shift (relative to the matrix Cr) equal to 0.4 mm/s and quadrupole splitting – 1.25 mm/s. Option 2 and Option 3 are characterized by scattering spectra with average values of isomer shift about 0.25 and 0.2 mm/s and quadrupole splitting – 0.5 and 0.6 mm/s, respectively. Comparison of data indicates that the formation of films in the case of options 2 and 3 gives the iron ions with increased  $s$ -electron density at the nuclei.

When using the SRIM analyzing the ion ranges and recoil atoms it is obtained that the peak recoil atoms toward the surface is displaced relative to the ions. The peak of implanted ions of helium it is locatel at a depth 2154 Å. Parameters stopped ions in the form of the projected range and radial section depending on the depth of the layer exhibit non-monotonic behavior at a maximum depth of penetration of ions. The number of oxygen atoms is significantly greater recoil than yttrium and iron atoms. The resulting two-dimensional graphics can be represented in the program SRIM as 3D-distribution in the depth target range 0 ... 1 micron width and pads 100 Å. The scattering spectrum of the YIG film after annealing at 800 K leads to the formation of a magnetically ordered phase. After that ions  $\text{H}^+$  and  $\text{He}^+$  were implanted. From the intensity ratio of the spectral lines of the magnetically ordered phase were estimated average value of the angle  $\theta$  between the normal to the film surface and the direction of the magnetic moment of the iron atoms, which coincides with the direction of the easy axis. The results obtained using the methods SRBS, CEMS agree well with each other and show significant heterogeneity YIG films. Implantation of helium ions leads to a change in orientation to the  $\bar{\theta} = 90^\circ$  only in  $\text{Bi}_{2.2}\text{Gd}_{0.8}\text{Fe}_{4.4}\text{Ga}_{0.6}\text{O}_{12}$ .

## Исследование локальной структуры $\text{BiNiO}_3$ методом зондовой мёсбауэровской спектроскопии на ядрах $^{57}\text{Fe}$

**Лекина Ю.О.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Белик А.А.<sup>2</sup>, Соболев А.В.<sup>1</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Material Science (NIMS), Цукуба (Япония)*  
yuliyalyokina@gmail.com

## Investigation of bismuth nickelate $\text{BiNiO}_3$ local structure by $^{57}\text{Fe}$ probe Mössbauer spectroscopy

Lekina Yu.O., Glazkova Ya.S., Belik A.A., Sobolev A.V., Presniakov I.A.

The local crystallographic and magnetic structures of  $\text{BiNiO}_3$  perovskite were investigated for the first time by  $^{57}\text{Fe}$  probe Mössbauer spectroscopy. It was shown the presence of ferric ions in distorted octahedral sites of  $\text{BiNiO}_3$  structure. Using a semi-quantitative nearest neighbor cluster model, the information about strength and sign of the super-exchange interactions between  $\text{Fe}^{3+}$  and  $\text{Ni}^{2+}$  ions has been obtained. A consistent description of the results in the framework of the Weiss molecular field model allowed to estimate exchange integrals.

Никелат  $\text{BiNiO}_3$  проявляет некоторые особенности по сравнению с другими  $R\text{NiO}_3$  со структурой типа перовскита, где  $R$  – редкоземельный элемент. Интерес к этому никелату и его катион-замещенным производным объясняется наблюдаемым для них отрицательным коэффициентом линейного температурного расширения, обусловленным спецификой процессов зарядового упорядочения. Согласно данным нейтронографических исследований и рентгеновской абсорбционной спектроскопии,  $\text{BiNiO}_3$  при обычных условиях обладает триклинной структурой, в которой диспропорционирование затрагивает подрешетку висмута:  $(\text{Bi}^{3+}_{0.5}\text{Bi}^{5+}_{0.5})(\text{Ni}^{2+})\text{O}_3$  при комнатной температуре.

В этой работе была впервые использована зондовая мёсбауэровская спектроскопия на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  для изучения локальных кристаллографической и магнитной структур никелата  $\text{BiNi}_{0.96}\text{Fe}_{0.04}\text{O}_3$  в широком интервале температур. Показано, что примесные атомы железа находятся только в трехвалентном состоянии. На основании полуэмпирических расчетов и сопоставления их с экспериментально оцененными значениями сверхтонких параметров были исследованы особенности магнитных состояний примесных атомов  $^{57}\text{Fe}$ .

Исследование поддержано грантами Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 16-33-01028 и № 14-03-00768.

## Исследование хромитов $R\text{CrO}_3$ ( $R = \text{Tl}, \text{Bi}$ ) со структурой перовскита методом зондовой мёссбауэровской спектроскопии на ядрах $^{57}\text{Fe}$

**Лекина Ю.О.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Вей И.<sup>2</sup>, Белик А.А.<sup>2</sup>, Соболев А.В.<sup>1</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Material Science (NIMS), Цукуба (Япония)  
yuliyalyokina@gmail.com

### $^{57}\text{Fe}$ probe Mössbauer investigation of $R\text{CrO}_3$ ( $R = \text{Tl}, \text{Bi}$ ) perovskites

Lekina Yu.O., Glazkova Ya.S., Wei Yi., Belik A.A., Sobolev A.V., Presniakov I.A.

Perovskite-type compounds of  $R^{3+}B^{3+}O_3$  general formula have been attracting a lot of attention for decades because of their physical and chemical properties. Chromites with  $R^{3+} = \text{Ti}^{3+}$  and  $\text{Bi}^{3+}$  have been investigated by  $^{57}\text{Fe}$  probe Mössbauer spectroscopy in comparison with rare-earth (REE) perovskite-type chromites. It has been shown, that saturation  $^{57}\text{Fe}$  hyperfine field  $H_{\text{hf}}(0)$  of  $\text{TiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  is far above of those for REE chromites. This feature was discussed in terms of  $\text{Ti}^{3+}$ -O bond covalence.  $\text{BiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  exhibits an unusual behavior of hyperfine field temperature dependence which was connected with spin-reorientation transition.

Соединения с общей формулой  $R\text{BO}_3$  ( $R^{3+} = \text{Y}, \text{La-Lu}, B^{3+} = \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$  и  $\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}$ ) со структурой перовскита уже долгое время привлекают много внимания в связи с их важными и интересными химическими и физическими свойствами.

В настоящей работе приведены мёссбауэровские исследования образцов  $\text{TiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  и  $\text{BiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  в широком интервале температур. Из температурных зависимостей сверхтонких параметров были оценены значения Температур Нееля  $T_N$ , сверхтонких магнитных полей насыщения  $H_{\text{hf}}(0)$  и сверхобменных интегралов  $J_{\text{Fe-O-Cr}}$ .

Сравнение значений температуры Нееля  $T_N$  и сверхтонких магнитных полей насыщения  $H_{\text{hf}}(0)$  хромитов  $\text{TiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  и  $\text{BiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$  со значениями для других хромитов  $R\text{CrO}_3$  ( $R^{3+} = \text{Y}, \text{La} - \text{Lu}$ ) показало существенно более низкие значения, чем ожидаемые для этих соединений. Такие различия были связаны с особенностями электронного строения ионов  $\text{Ti}^{3+}$  и  $\text{Bi}^{3+}$ .

Кроме того, было продемонстрировано необычное поведение сверхтонкой магнитной структуры хромита висмута  $\text{BiCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ , связанное со спин-переориентационным переходом при низких температурах.

Работа поддержана грантом Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 14-03-00768.

## Локальные структурные состояния примесных атомов железа в перовскитах $\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$ ( $x = 0 - 0.50$ )

**Макарова А.О.<sup>1</sup>, Покатилов В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>1</sup>, Китаев В.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону (Россия)

pokatilov@mirea.ru

### Local structural states of Fe – impurity atoms in the perovskites

$\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0 - 0.50$ )

**Makarova A.O., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Kitaev V.V.**

The perovskites  $\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0 - 0.50$ ) were studied by Mössbauer effect on impurity nuclei of  $^{57}\text{Fe}$  at room temperature and 12 K. The octahedral and pyramidal positions of Fe atoms were detected.

Анализ литературных данных показывает, что проблема локальных структурных и валентных состояний, которые существенно влияют на магнитные, электрические и другие физические свойства, в системе перовскитов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_{3-y}$  ( $x = 0.00, 0.15, 0.25, 0.30$  и  $0.50$ ) остается открытой. Целью представленной работы являлось исследование влияния замещения ионов  $\text{La}^{3+}$  ионами  $\text{Sr}^{2+}$  на локальные структурные и валентные состояния ионов железа в перовскитах системы  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_{3-y}$  ( $x = 0.00, 0.15, 0.25$  и  $0.50$ ) методом эффекта Мёссбауэра на примесных ядрах  $^{57}\text{Fe}$ .

Методом стандартного твердофазного синтеза приготовлены однофазные образцы системы перовскитов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0.00, 0.15, 0.25$  и  $0.5$ ). Рентгенографические исследования показали, что кристаллическая структура образцов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  ( $x = 0.00, 0.15$  и  $0.25$ ) – ромбоэдрическая, а  $\text{La}_{0.50}\text{Sr}_{0.50}\text{Co}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  – кубическая. Перовскиты были исследованы методом эффекта Мёссбауэра на примесных ядрах  $^{57}\text{Fe}$  при комнатной температуре (КТ) и 12 К. Для обработки и анализа мёссбауэровских спектров использована программа SpectrRelax. В перовските  $\text{LaSrCo}_{0.98}\text{}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$  атом Fe занимает позиции  $\text{Co}^{3+}$ . При КТ обнаружено одно трехвалентное локальное структурное состояние атомов  $\text{Fe}^{3+}$  в слабо искаженном октаэдрическом кислородном окружении. Замещение ионов  $\text{La}^{3+}$  на ионы  $\text{Sr}^{2+}$  приводит к появлению  $\text{Co}^{4+}$ . Для составов  $x = 0.15$  и  $0.25$  атомы  $\text{Fe}^{3+}$  находятся в искаженном октаэдрическом и пирамидальном кислородном окружении, а для  $x = 0.50$  – в пирамидальных позициях. При  $T = 12$  К в перовскитах обнаружены три наиболее вероятных состояния примесных атомов Fe, сверхтонкие параметры которых значительно отличаются. Эти состояния атомов железа соответствуют 6-, 5- и 4- кислородным окружениям.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01147а) и Минобрнауки РФ (проект № 3.1137.2014К).



## Мёссбауэровское исследование магнитного фазового перехода в соединении $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$

**Наумов С.П., Вершинин А.В., Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В.**

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*

naumov\_sp@imp.uran.ru

### Mössbauer study of magnetic phase transition in $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$

Naumov S.P., Vershinin A.V., Serikov V.V., Kleinerman N.M., Mushnikov N.V.

Aiming at the ascertainment of interrelation between the magnetic state and local structure peculiarities of the compounds  $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_2$ , the antiferromagnet-to-ferromagnet transition in  $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$  has been studied using Mössbauer spectroscopy. The experimental results show that rhombohedral distortions characteristic of the antiferromagnetic phase are locally retained in the ferromagnetic state as well.

Интерес к соединениям  $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_2$  ( $M = \text{Si}, \text{Co}, \text{Ru}$  и т.д.) обусловлен их сложной магнитной фазовой диаграммой. Замещение части атомов Fe атомами Si приводит при понижении температуры к магнитному фазовому переходу из ферромагнитного (F) в антиферромагнитное (AF) состояние, который сопровождается изменением кристаллической структуры ( $\text{Fd}\bar{3}m - \text{R}\bar{3}m$ ).

В данной работе проведено мёссбауэровское исследование фазового перехода AF – F в соединении  $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$ . Из спектров, полученных при температурах, соответствующих AF, AF – F и F состояниям, восстановлены одноядерные распределения сверхтонких полей  $P(H_{\text{hf}})$ , приведенные на рис. 1. Согласно модели AF структуры, предложенной в [1], три области в  $P(H_{\text{hf}})$  можно приписать к резонансным атомам Fe в различных кристаллографических позициях. Наблюдаемые при фазовом переходе AF – F изменения в  $P(H_{\text{hf}})$  свидетельствуют о том, что на локальном уровне ромбоэдрические искажения сохраняются и в ферромагнитной кубической фазе.

Работа поддержана РФФИ, проект 15-02-05681.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Paolasini L. Magnetic Ground State of Pure and Doped  $\text{CeFe}_2$  / L. Paolasini, B. Ouladdiaf, N. Bernhoeft, J-P. Sanchez, et al. // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 90. – № 5. – P. 057201-1–057201-4.

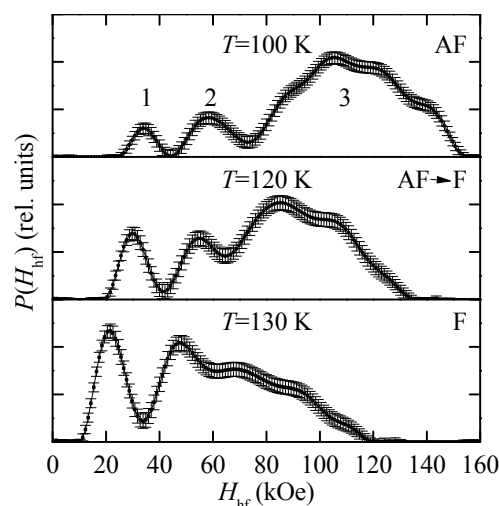


Рис. 1. Распределения  $P(H_{\text{hf}})$ , восстановленные из спектров  $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$

## Мёссбауэровские исследования мультиферроиков $\text{BiFeO}_3$ допированных хромом: $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ( $x = 0.0 - 0.30$ )

**Покатилов В.С.<sup>1</sup>, Русаков В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>1</sup>, Белик А.А.<sup>3</sup>, Глазкова Я.С.<sup>2</sup>  
Мацнев М.Е.<sup>2</sup>, Ярославцев С.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>3</sup>National Institute for Materials Science, Tsukuba (Japan)

pokatilov@mirea.ru

### Mössbauer study of Cr-doped $\text{BiFeO}_3$ : $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ( $x = 0.00 - 0.30$ )

Pokatilov V.S., Rusakov V.S., Sigov A.S., Belik A.A., Glazkova Ya.S.,  
Matsnev M.E., Yaroslavtsev S.A.

Study of the effect of substitution of Fe atoms by Cr atoms on spatial spin-modulated structure, as well as electric and magnetic hyperfine interactions of the  $^{57}\text{Fe}$  nucleus in multiferroic  $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$  ( $x = 0.0 - 0.30$ ) was carried out by Mössbauer spectroscopy at room temperature.

Усиление ангармонизма пространственной спин-модулированной структуры (ПСМС) в мультиферроиках на основе  $\text{BiFeO}_3$  увеличивает магнитоэлектрический эффект. Этот результат достигается несколькими способами, один из которых – замещение атомов Fe атомами переходных  $d$ -элементов. Мерой разрушения ПСМС является параметр ангармонизма  $m$ . В работе исследовано влияние замещения атомов Fe атомами Cr на ПСМС в мультиферроиках  $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$  ( $x = 0.0-0.30$ ). Мультиферроики синтезировались при давлении 6 ГПа. Кристаллическая решетка образцов – ромбоэдрическая с пространственной группой  $R3c$ . Мёссбауэровские спектры измерялись при комнатной температуре. Для обработки и анализа мёссбауэровских спектров использована программа SpectrRelax.

При замещении части атомов железа на атомы хрома в количестве  $x = 0.05, 0.10, 0.20, 0.25$  и  $0.30$  мёссбауэровские спектры значительно уширились по сравнению с  $\text{BiFeO}_3$ . В замещенных ферритах образуется ангармоническая модулированная спиновая структура циклоидного типа, в которой участвуют атомы железа с различным катионным окружением. Установлено, что параметр ангармонизма  $m$  линейно увеличивается от  $m = 0.09 \pm 0.02$  при  $x = 0.00$  до  $m = 0.78 \pm 0.02$  при  $x = 0.20$ , а при  $x = 0.25$  и  $0.30$   $m = 1$ . Оценены константы магнитной одноосной анизотропии  $K_u$  в зависимости от содержания хрома: при комнатной температуре  $K_u \approx 0.36 \cdot 10^6$  эрг/см<sup>3</sup> для  $x = 0.0$  и увеличивается до  $K_u \approx 4.22 \cdot 10^6$  эрг/см<sup>3</sup> при  $x = 0.20$ .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01109а) и Минобрнауки РФ (госзадание № 2014/112 проект № 1066).

## Температурные исследования пространственной спин-модулированной структуры мультиферроика $\text{BiFe}_{0.95}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$ методами мёссбауэровской спектроскопии

Русаков В.С.<sup>1</sup>, Покатилов В.С.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>2</sup>, Белик А.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Московский технологический университет, Москва (Россия)

<sup>3</sup>National Institute for Materials Science, Tsukuba (Japan)

pokatilov@mirea.ru

### Temperature studies of the spatial spin-modulated structure of multiferroic $\text{BiFe}_{0.95}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$ by Mössbauer spectroscopy

Rusakov V.S., Pokatilov V.S., Sigov A.S., Belik A.A.

The effect of substitution of Fe cations for Cr cations in  $\text{BiFe}_{0.95}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$  on hyperfine interaction parameters and the spatial spin-modulated structure was investigated by the method of Mössbauer effect on  $^{57}\text{Fe}$  nucleus in temperature range 5–650 K.

В работе методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  исследовано влияние замещения атомов железа атомами хрома на локальные магнитные и валентные состояния атомов железа, а также параметры пространственной спин-модулированной структуры (ПСМС). Образцы мультиферроика  $\text{Bi}^{57}\text{Fe}_{0.10}\text{Fe}_{0.85}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$  получены при давлении 6 ГПа и  $T = 1250$  К. Параметры кристаллической ромбоэдрической решетки образца феррита  $\text{Bi}^{57}\text{Fe}_{0.10}\text{Fe}_{0.85}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$  равны  $a = 5.57621$  Å и  $c = 13.8564$  Å. Для обработки и анализа мёссбауэровских спектров использована программа SpectrRelax. В результате восстановления распределения сверхтонкого магнитного поля  $H_n$  определены температурные зависимости средних значений сверхтонких параметров (сдвига, квадрупольного смещения и магнитного поля). Мёссбауэровские спектры феррита расшифровывались в рамках модели ангармонической ПСМС циклоидного типа несколькими парциальными спектрами, соответствующими позициям атомов железа, в первой катионной координационной сфере которых распределены 0, 1 и 2 атома примеси Cr. В результате модельной расшифровки получены температурные зависимости изотропного  $H_{is}$  и анизотропного  $H_{an}$  вкладов в сверхтонкие магнитные поля для атомов  $^{57}\text{Fe}$  с различным количеством атомов Cr в ближайшем катионном окружении. В рамках выбранной модели получена температурная зависимость параметра ангармонизма  $m$  спиновой волны. При увеличении температуры параметр ангармонизма  $m$  уменьшается с  $0.50 \pm 0.05$  (при  $T = 5.2$  К) до нуля при  $\sim 425$  К.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-01109а) и Минобрнауки РФ (госзадание № 2014/112 проект № 1066).

## Распределение атомов железа в фазах Ауривиллиуса по данным спектроскопии ЯГР

**Панчук В.В.<sup>1,3</sup>, Ломанова Н.А.<sup>2</sup>, Семенов В.Г.<sup>1,3</sup>, Гусаров В.В.<sup>2</sup>, Иркаев С.М.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург (Россия)

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
Санкт-Петербург (Россия)

<sup>3</sup>Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург (Россия)  
vitpan@mail.ru

### Distribution of Fe atoms in Aurivillius phases obtained with Mössbauer spectroscopy

Panchuk V.V., Lomanova N.A., Semenov V.G., Gusarov V.V., Irkaev S.M.

The present investigation considers Fe distribution over the nonequivalent sites in the perovskite-like block for a large group of the Aurivillius phases  $\text{Bi}_{(n+1)}\text{Fe}_{(n-3)}\text{Ti}_3\text{O}_{(3n+3)}$  and analyzes the Fe ions fraction and condition as a function of the octahedral layers number ( $n$ ) in the perovskite-like block. The observed results are in a good agreement with previously published theoretical considerations [1].

Слоистые перовскитоподобные соединения в системе  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$  являются перспективными для создания новых материалов, так как обладают каталитическими, полупроводниковыми, сегнетоэлектрическими, магнитными свойствами. Строение фаз Ауривиллиуса с общей формулой  $\text{Bi}_{n+1}\text{Fe}_{n-3}\text{Ti}_3\text{O}_{3n+3}$  может рассматриваться как чередование флюоритоподобных слоев  $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$  и перовскитоподобных блоков  $(\text{Bi}_{n+1}\text{Fe}_{n-3}\text{Ti}_3\text{O}_{3n+1})^{2-}$ . Как мы уже показали ранее [2] параметры мессбауэровских подспектров для атомов железа во внешних и внутренних позициях перовскито-подобных слоев отличаются как по величине химического сдвига, так и по величине квадрупольного расщепления. В настоящей работе приводятся результаты обработки экспериментальных спектров в соответствии с теоретическими предположениями, высказанными в [1].

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ (грант № 16-03-00532 А).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Birenbaum A.Y.* Potentially multiferroic Aurivillius phase  $\text{Bi}_5\text{FeTi}_3\text{O}_{15}$ : Cation site preference, electric polarization, and magnetic coupling from first principles / A.Y. Birenbaum, C. Ederer // *Phys. Rev. B* – 2014. – V. 90. – №. 21. – P. 214109.
2. *Lomanova N.* Structural changes in the homologous series of the Aurivillius phases  $\text{Bi}_{(n+1)}\text{Fe}_{(n-3)}\text{Ti}_3\text{O}_{(3n+3)}$  / N. Lomanova, V. Semenov, V. Panchuk and V. Gusarov // *J. Alloys Comp.* – 2012. – V. 528. – P. 103 -108.

## Local crystal and magnetic structure of $\text{Ag}_2\text{FeO}_2$ and $\text{Ag}_2\text{Ga}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_2$ : a $^{57}\text{Fe}$ Mössbauer study

Sobolev A.V.<sup>1</sup>, Belik A.A.<sup>2</sup>, Glazkova Ya.S.<sup>1</sup>, Ovanesyan N.S.<sup>3</sup>, Presniakov I.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba (Japan)*

<sup>3</sup>*Institute of Problems of Chemical Physics, Chernogolovka (Russia)*

ipresniakov@rambler.ru

We have studied the local crystal structure and magnetic properties of new disilver layered oxides  $\text{Ag}_2\text{FeO}_2$  and  $\text{Ag}_2\text{Ga}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_2$  demonstrating metallic conductivity. The  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer measurements have shown that in both structures iron ions are stabilized as  $\text{Fe}^{3+}$  which assumes the similarity of the formal valence distribution in  $(\text{Ag}_2)^+[(\text{Ga,Fe})^{3+}\text{O}_2]^-$ . The observed in spectra of  $\text{Ag}_2\text{Ga}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_2$  the line-area asymmetry is entirely associated with the texture effects, *i.e.*, preferred orientation of platy crystalline in the plane of sample surface. Single Zeeman pattern in the  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectrum of  $\text{Ag}_2\text{FeO}_2$ , measured at  $T < T_N \approx 20$  K, reflects the equivalence of magnetic positions occupied by  $\text{Fe}^{3+}$  ions with the hyperfine field  $H_{\text{hf}(10\text{K})} \approx 485$  kOe acting on the  $^{57}\text{Fe}$  nuclei which is directed perpendicular to the *c*-axis (parallel to the principal axis  $V_{ZZ}$  of the EFG tensor) with planar (XY)-anisotropy. The spectra of the ferrite show unusual magnetic relaxation behavior below  $T_N$ , as if the long-range magnetic ordering coexisted with rapid spin fluctuations. We discuss a phenomenological *Kosterlitz-Thouless* model, assuming that ideal 2D planar magnet, besides spin-wave excitations, exhibits a specific non-linear excitations in a form of coupled vortex pairs with opposite helicities freely moving in a plane.

This work is supported by the Russian Foundation for Basic Research №14-03-00768.

## Мёссбауэровское исследование распределения катионов в кобальтитах-ферритах $\text{ScCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$

**Соболев А.В.<sup>1</sup>, Вей И.<sup>2</sup>, Пресняков И.А.<sup>1</sup>, Глазкова Я.С.<sup>1</sup>, Белик А.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Национальный Институт Наук о Материалах, Цукуба (Япония)

alex@radio.chem.msu.ru

### <sup>57</sup>Fe Mössbauer investigation of cation distribution in $\text{ScCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ cobaltites-ferrites

Sobolev A.V., Wei Yi, Presniakov I.A., Glazkova Ya.S., Belik A.A.

We report the results of <sup>57</sup>Fe Mössbauer studies on perovskite-like cobaltites-ferrites  $\text{ScCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$  ( $x = 0.05, 0.4$ ), where the partial "inversion" of the positions of cations with similar size  $A^{3+}$  (= Sc) and  $M^{3+}$  (= Fe, Co) is possible. It was shown that <sup>57</sup>Fe<sup>3+</sup> ions occupy two crystallographic positions corresponding to the *A* and *B* sublattices of  $\text{ABO}_3$  perovskite.

Кобальтит  $\text{ScCoO}_3$  относится к сильнокоррелированным системам, богатая физика которых связана с электронными процессами зарядового, спинового и орбитального упорядочений. Использование высокого давления в процессе синтеза позволяет стабилизировать небольшие катионы  $\text{Sc}^{3+}$  в нехарактерных для них "просторных" кислородных полиэдрах  $(\text{ScO}_n)^{m-}$  с высокими координационными числами ( $n = 8-12$ ), что приводит к принципиально иному, по сравнению с изоструктурными оксидами  $\text{RCoO}_3$  ( $R = \text{PЗЭ}$ ), искажению перовскитоподобной структуры. Установлено, что в рассматриваемых перовскитах возможна частичная "инверсия" позиций близких по размеру катионов  $A^{3+}$  (= Sc) и  $M^{3+}$  (= Fe, Co).

Исследования сверхтонких взаимодействий на ядрах <sup>57</sup>Fe (~ 1 ат.%) в кобальтите  $\text{ScCoO}_3$  при  $T > T_N$  показали, что атомы железа стабилизируются в двух разных кристаллографических позициях, первая из которых отвечает высокоспиновым катионам  $\text{Fe}^{3+}$ , находящимся в подрешетке с октаэдрической кислородной координацией, а вторая – также высокоспиновым катионам железа, но замещающим катионы  $\text{Sc}^{3+}$  с высоким координационным числом. Установлено, что помимо катионов железа скандий также частично замещен на высокоспиновые катионы  $\text{Co}^{3+}$  ( $S = 2$ ), в то время как в октаэдрических позициях катионы кобальта  $\text{Co}^{3+}$  ( $S \approx 0$ ) находятся в низкоспиновом состоянии. Увеличение содержания железа в  $\text{ScCo}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_3$  не приводит к существенным изменениям в мёссбауэровских спектрах.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, гранты № 14-03-00768, № 16-33-00760, № 16-03-01065.

## Особенности распределения спиновой плотности в $\text{CuFeS}_2$ по данным ЯМР $^{63,65}\text{Cu}$ в локальном поле

**Сопина Ю.В., Погорельцев А.И., Шмидт С.В., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.**

*Казанский государственный энергетический университет, Казань (Россия)*  
apogoreltsev@rambler.ru

### Peculiarity of spin density distribution in $\text{CuFeS}_2$ by results of NMR $^{63,65}\text{Cu}$ in the internal magnetic field

Sopina Yu.V., Pogoreltsev A.I., Schmidt S.V., Matukhin V.L., Schmidt E.V.

The resonance NMR spectra of  $^{63,65}\text{Cu}$  were studied experimentally in a local field. The experimental values of quadrupole frequency  $\nu_Q$  and parameter of asymmetry  $\eta$  were used for research Laplacian of the electron density in area of quadrupole nuclei in position of Cu. For the cluster  $\text{Cu}_9\text{Fe}_{10}\text{S}_{28}^{-4}$ , maps of the electron density distribution and maps of the spin density distribution were built. Based on the analysis of the resulting electron density distribution and spin density distribution for two Fe positions, it is suggested that the bond in chalcopyrite is intermediate type.

В настоящей работе представлены результаты исследований спектров ЯМР  $^{63,65}\text{Cu}$  в локальном поле в халькопирите. Был использован кластерный подход. Расчеты проведены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри - Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF) с опорой на квадрупольные параметры (квадрупольная частота  $\nu_Q$  и параметр асимметрии тензора градиента электрического поля  $\eta$ ). Для кластера  $\text{Cu}_9\text{Fe}_{10}\text{S}_{28}^{-4}$  строились карты распределения электронной плотности, спиновой плотности, а также рельефные карты Лапласиана электронной плотности в области квадрупольного ядра меди. Обнаружено, что распределение электронной плотности для различных цепочек Cu-S-Fe может заметно отличаться. В частности, для одних областей распределение электронной плотности носит ионный характер, а для других – характер распределения электронной плотности близок к ковалентному. В результате наблюдается заметное различие в распределении спиновой плотности для различных цепочек Cu-S-Fe. Поэтому можно предположить, что связь в халькопирите носит промежуточный характер. Этот вывод подтверждается и анализом рельефной карты Лапласиана электронной плотности в области квадрупольного ядра меди.

## Исследование магнитных свойств натриевых кобальтатов, допированных ионами железа

**Хасанов Р.Н., Гильмутдинов И.Ф., Вагизов Ф.Г., Мухамедшин И.Р.**

*Институт физики КФУ, Казань (Россия)*

scummmman@gmail.com

### Magnetic properties of Fe-doped sodium cobaltates

Khasanov R.N., Gilmutdinov I.F., Vagizov F.G., Mukhamedshin I.R.

We report magnetic properties and  $^{57}\text{Fe}$  probe Mössbauer studies of the sodium cobaltate  $\text{Na}_x\text{Co}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ . The Mössbauer spectra at room temperature are characterized by two electric quadrupole doublets corresponding to two Fe sites. The existence of two different values of the quadrupole splitting could be related to the charge ordering of Na ions.

Сильно-коррелированные системы обладают уникальными термоэлектрическими свойствами. Так натриевые кобальтаты  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  сочетают в себе высокую электропроводимость и большой коэффициент термо-ЭДС. Последний связывают с наличием высокой спиновой энтропии в данном соединении [1]. Допирование натриевых кобальтатов ионами переходных металлов является одним из способов влияния на спиновую энтропию и позволяет изменять термоэлектрические характеристики. Существует ряд теоретических и экспериментальных работ, исследующих влияние допирования ионами железа на термоэлектрические свойства натриевого кобальтата. Однако неясно, как распределяются ионы железа по кристаллографическим позициям, и какие искажения они вносят в кристаллическую решетку. Также остается открытым вопрос о зарядовом состоянии ионов железа и влиянии упорядочения ионов натрия на него.

В работе представлены результаты исследования магнитных свойств натриевого кобальтата  $\text{Na}_{0.67}\text{CoO}_2$ , допированного 1% Fe и эффекта Мёссбауэра на зондовых атомах  $^{57}\text{Fe}$ .

Поликристаллический образец был приготовлен методом твердофазного синтеза. Рентгеновская дифрактограмма соответствует соединению  $\text{Na}_{0.67}\text{CoO}_2$ . Мёссбауэровский спектр при комнатной температуре состоит из двух квадрупольных дублетов, которые соответствуют различным зарядовым состояниям ионов железа. Зарядовое расслоение может быть вызвано упорядочением ионов натрия.

Работа выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности КФУ и при частичной финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Kaurav N. Seebeck coefficient of  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ : Measurements and a narrow-band model / N. Kaurav, K. K. Wu, Y. K. Kuo, G. J. Shu, F. C. Chou // Physical Review B. – 2009. – V. 79. – №. 7. – P. 075105.



## Мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования соединений в системе BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

**Шипко М.Н.<sup>1</sup>, Коровушкин В.В.<sup>2</sup>, Степович М.А.<sup>3</sup>, Костишин В.Г.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина, Иваново (Россия)*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва (Россия)*

<sup>3</sup>*Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского, Калуга (Россия)*  
ivrgteu\_nir@mail.ru, krvsch@mail.ru

## Mössbauer and X-ray diffraction analysis of compounds in the system BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Shipko M.N., Korovushkin V.V., Stepovich M.A., Kostishin V.G.

The studies of the structures of compounds enriched in barium in the system BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> were performed. As a result of the research showed the possibility of synthesis of stable in a wide temperature range single-phase compounds  $n\text{BaO} \cdot m\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $n \geq 1, m = 2$ ).

Исследованы соединения системы BaO-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, обогащенные барием и предназначенные для синтеза ферритов с гексагональной структурой. Данные мёссбауэровской спектроскопии и рентгеноструктурного анализа говорят о возможности синтеза однофазных соединений  $n\text{BaO} \cdot m\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $n \geq 1, m = 2$ ), устойчивых в широком интервале температур, формирование кристаллической структуры которых происходит в результате процессов, основным из которых является диффузия ионов Ba<sup>2+</sup> и O<sup>2-</sup> в кристаллическую решетку  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ . Предложены две модели кристаллической решетки соединений  $n\text{BaO} \cdot m\text{Fe}_2\text{O}_3$ . В первой модели в качестве систематизирующего критерия использован характер сочленения анионных полиэдров: октаэдров и тетраэдров. Определена их заселенность ионами железа, степень их локального искажения и электронная конфигурация ионов железа. Вторая модель структуры соединений исходит из слоистого распределения анионов и катионов в направлении оси *c* кристаллов и позволяет оценить концентрацию и характер распределения катионных и анионных вакансий. Предложенные модели позволяют определить механизм формирования и трансформации кристаллических решеток соединений BaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Ba<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, Ba<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, а также их устойчивость при комнатной температуре. Установлено, что в системе BaO: Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в интервале температур 1250–1450 К наиболее вероятным процессом является образование соединения Ba<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub> на основе полиморфной модификации BaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.

Исследования проведены при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (базовая часть госзадания, задание № 340/2015, проект № 1416, а также проектная часть госзадания, соглашение о предоставлении субсидии № 1457521003005 от 27 июня 2014 г.).

## Study of nanocrystallized NANOPERM-type metallic glass

**Volfova L.<sup>1</sup>, Cesnek M.<sup>2</sup>, Lancok A.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Physics CAS, Prague (Czech Republic)*

<sup>2</sup>*Faculty of Nuclear Science and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Prague (Czech Republic)*

<sup>3</sup>*Institute of Inorganic Chemistry CAS, Husinec-Rez (Czech Republic)*

volfl@fzu.cz

The amorphous NANOPERM-type alloy of composition  $\text{Fe}_{76}\text{Mo}_8\text{Cu}_1\text{B}_{15}$  was prepared by single-roller technique in the form of thin ribbon. “As-quenched” sample also was investigated by Mössbauer spectroscopy (MS). MS spectra exhibit broadened lines what indicates amorphous structure of material. Neither MS spectrum obtained from air side or wheel side exhibit presence of crystalline components. This assignment is in good agreement with results obtained by X-ray diffraction (XRD). Thus, the spectrum was refined by several spectral components. Magnetic and XRD measurements were performed to confirm this assumption. The ribbons of about 20  $\mu\text{m}$  thickness were annealed at several temperatures. Structural arrangement was studied by scanning electron microscopy with energy dispersive spectrometry and transmission electron microscopy. The nanocrystallized samples contained up to 60 % of the crystalline phase with the mean size of the crystals equal to about 10–15 nm.

Financial support by the research grant GAČR 14-12449S is acknowledged.

### REFERENCES

1. *Miglierini M.* Subsurface structure and magnetic parameters of Fe-Mo-Cu-B metallic glass / M. Miglierini, M. Hasiak, M. Bujdos // *Nukleonika*. – 2015. – V. 60. – № 1. – P. 115–119.

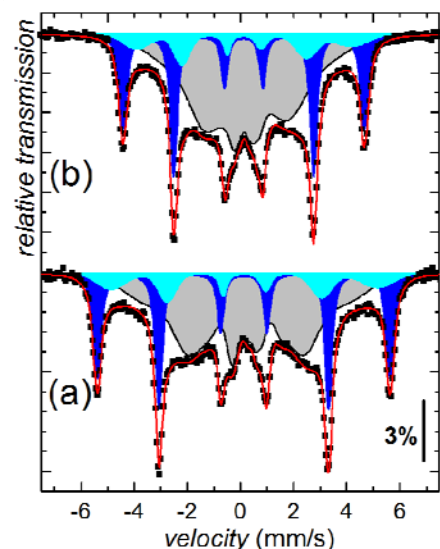


Fig. 1. The Mössbauer spectra of the sample annealed at 550 °C taken at 4.2 K without field (a), and with external field of 6 T applied perpendicularly to the beam direction and in plane of ribbons (b)

## Magnetic phase separation in systems with long-period magnetic structures exploring by Mössbauer spectroscopy

**Voronina E.V.<sup>1</sup>, Chistyakova N.I.<sup>2</sup>, Pyataev A.V.<sup>1</sup>, Chumakov A.I.<sup>3</sup>, Ivanova A.G.<sup>1</sup>, Arzhnikov A.K.<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*

<sup>3</sup>*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France)*

<sup>4</sup>*Physical-Technical Institute, Ural Branch, Russian Academy of Science, Izhevsk (Russia)*

evoronina2005@ya.ru

Non-collinear and collinear disordered and ordered long-period modulated magnetic structures have aroused considerable interest in modern physics of magnetic phenomena. Varying topological and electronic properties of the Fe-Al system we aimed to understand the origin of the spiral spin structures observed in this system. Doping of isoelectron to aluminum  $M_x$  atoms (Ga, B) varies a lattice constant (similar to external pressure), whereas doping of  $M_y$  atoms (V, Mn) varies the number of  $d$ -electrons. The Mössbauer spectra of the binary alloy and ternary quasi-ordered  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35-x}\text{M}_x$  and  $\text{Fe}_{65-y}\text{Al}_{35}\text{M}_y$  alloys ( $M = \text{Ga, B, V, Mn}$ ;  $x, y = 3, 5, 10$  at. %) were measured at variable temperature (3.3 – 80 K) and magnetic field (0 – 7 T). At first, we studied the possibility of interpretation of the Mössbauer spectra within the model of spatially separated magnetic states (phases) (of nanometer scale), one of which is ferromagnetic or ferrimagnetic, and the second relates to the structure of the static incommensurate spin density wave.

Analysis of the Mössbauer spectra measured under the applied magnetic field showed clearly that the spectra contain components corresponding to the atoms of Fe, with the orientation of the magnetic moments coinciding with the direction of the applied field.  $^{57}\text{Fe}$  hyperfine magnetic field (HMF)  $B_{hf}$  values of these atoms are in the range [15.0 ÷ 33.0 T]. Besides, in spectra there are components exhibiting the behavior non-characteristic of ferromagnetic magnetic moments. These components show the values of HMF in the range [0 ÷ 15.0–17.5 T]. From these considerations the model of magnetic microstructures is supposed. Mössbauer spectrum is represented as a superposition of discrete components (associated with the  $^{57}\text{Fe}$  atom in a particular local environment) and the contribution from the resonance of atoms whose magnetic moments (and the values of HMF) vary from site to site in proportion to the value of the static incommensurate spin density wave. The calculations showed that the Mössbauer spectra of the binary alloy  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35}$  and ternary alloys can be fitted in the assumption of a two-phase magnetic structure: one phase is ferromagnetic and the second phase refers to the static incommensurate spin density wave. The parameters of the calculated spin density waves having rectangular form have been determined.

## *Topic II*

*Surface, thin films and nanosystems*

# Mössbauer spectroscopy of iron-containing nanoparticles in different types of materials

Adriana Lancok

*Institute of Inorganic Chemistry CAS, Husinec-Rez (Czech Republic)*  
ada@iic.cas.cz

Nanomaterial is interesting material for artworks, biomedical and industrial applications especially in the field of nuclear installations. Our aim was to study of iron-containing nanoparticles in different type of materials; e.g. disks, powders, thin films etc. The methods for preparing of nanomaterials have attracted considerable scientific interest in recent years. These materials are structurally well ordered with very well-defined and exhibit unique physico-chemical properties determined by their practically applications. The aim of the lecture is to give an overview of current trends and perspectives in the research of above mentioned classes of nanomaterials.

Mössbauer spectrometry was chosen as a principal method of investigation. Complex behaviour of magnetic and non-magnetic phases of nanomaterials was identified in the samples by Conversion Electron Mössbauer Spectrometry and transmission technique. Chemical composition was checked by neutron activation analysis and X-ray fluorescence technique. Structural arrangement was studied by scanning electron microscopy with energy dispersive spectrometry and transmission electron microscopy. In the presentation, I will discuss the properties of different type of nanomaterials for various applications.

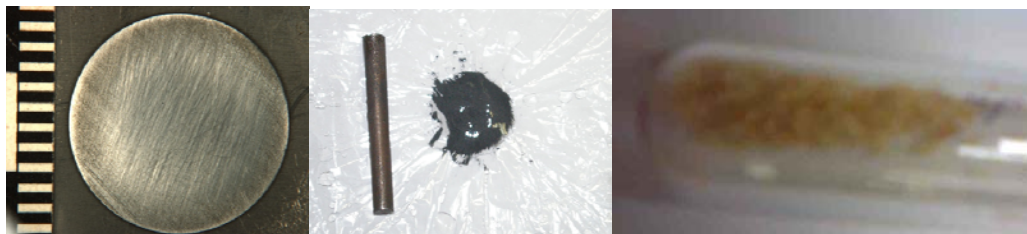


Fig. 1. Different type of nanomaterials

## REFERENCES

1. *Lancok A.* Structural Characterization of Highly Corrosion-resistant Steel / A. Lancok, T. Kmjec, M. Stefanik, L. Sklenka, M. Miglierini // *Croatia Chemica Acta.* – 2015. – V. 88. – № 4. – P. 355–361.
2. *Cermakova Z.* Temperature-related degradation and colour changes of historic paintings containing vivianite / Z. Cermakova, S. Svarcova, J. Hradilova, P. Bezdicka, A. Lancok, V. Vasutova, J. Blazek, D. Hradil // *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* – 2015. – V. 140. – P. 101–110.
3. *Miglierini M.* Magnetic Behaviour of Ferritin Nanoparticles / M. Miglierini, A. Lancok // *Acta Physica Polonica A.* – 2010. – V. 118. – № 5. – P. 944–945.

## Mössbauer spectroscopy of grain boundaries in ultrafine-grained materials processed by severe plastic deformation

**Popov V.V., Sergeev A.V., Stolbovsky A.V.**

M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg (Russia)  
vpopov@imp.uran.ru

One of the most important features of materials processed by severe plastic deformation (SPD) along with their ultrafine-grained (UFG) structure is the specific state of grain boundaries (GBs). These GBs are often referred to as “non-equilibrium”, and their specific feature is an excess free volume [1]. Emission Mössbauer spectroscopy is one of few investigation methods enabling to reveal the non-equilibrium state of grain boundaries [2].

The present study demonstrates capabilities of investigation of GBs in UFG Mo and W, obtained under the SPD by high pressure torsion, by the method of emission Mössbauer spectroscopy on  $^{57}\text{Co}$ ( $^{57}\text{Fe}$ ) nuclei.

According to the data obtained, after the SPD there are two components in the Mössbauer spectra of UFG Mo and W, one of which, component 1, is formed by the Mössbauer atoms localized in grain boundaries proper, whereas another one, component 2, by the atoms located in near-boundary areas of crystallites. The isomer shifts of both lines in the materials under study, processed by SPD, are considerably lower than in case of coarse-grained Mo and W annealed at the same temperatures, which is probably due to the excess free volume connected with the non-equilibrium grain boundaries and their near-boundary areas formed under the SPD. Beginning from 773 K in case of UFG W and 673 K in case of UFG Mo there appear two more components in the spectra, components 3 and 4. The isomer shifts of these components are considerably higher than those of components 1 and 2, and their appearance is probably due to the recovery processes in GBs formed under the SPD and their near-boundary areas, resulting in the decrease of the excess free volume. With the increasing annealing temperature the intensities of components 1 and 2 decrease, whereas those of components 3 and 4 increase, and at 873 K in case of W and 823 K in case of Mo components 1 and 2 disappear from the Mössbauer spectra, which indicates that at these temperatures there are no more non-equilibrium GBs formed under the SPD, and only the boundaries which have undergone the recovery are present.

The work was supported by the State Program “Spin”, the Program of Fundamental Research of UB RAS (project 15-9-2-44) and by RFBR (project 15-03-03103).

### REFERENCES

1. *Chuvildeev V.N.* Non-equilibrium grain boundaries in metals. Theory and applications / V.N. Chuvildeev. Moscow: Fizmatlit. – 2004. – 303 p.
2. *Popov V.V.* Mössbauer Spectroscopy of Interfaces in Metals // V.V. Popov. - Phys. Met. Metallogr. – 2012. – V. 113. – № 13. – P. 1257-1289.

## Структурно-фазовые переходы при мегапластической деформации азотированной нержавеющей стали

Литвинов А.В., Шабашов В.А., Завалишин В.А., Афанасьев С.В.,  
Коршунов Л.Г., Катаева Н.В.

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
litvinov@imp.uran.ru

### Structural-phase transitions during megaplastic deformation of nitrided stainless steel

Litvinov A.V., Shabashov V.A., Zavalishin V.A., Afanas'ev S.V., Korshunov L.G., Kataeva N.V.

The influence of deformation on structural transformations in the surface layers and the volume of iron alloys with FCC crystal lattice (Fe-Ni, Fe-Ni-Cr, Fe-Mn-Cr, etc.) containing the nitrides Fe<sub>4</sub>N and CrN.

Осуществлено твердофазное механическое легирование азотом нержавеющей сталей и сплавов железа (Fe-Ni, Fe-Ni-Cr, Fe-Mn-Cr и др.) в процессе деформационного растворения нитридов, сформированных в металлических матрицах при ионно-плазменном азотировании и с использованием противодавления.

В азотированной поверхности сталей Fe-18Cr-8Ni и Fe-22Mn-18Cr-0.8N при использовании сдвига под давлением и фрикционного воздействия обнаружено растворение продуктов ячеистого распада (Cr<sub>2</sub>N) с формированием пересыщенного азотом аустенита. Установлена связь сопротивления изнашивания стали Fe-22Mn-18Cr-0.8N со степенью растворения продуктов ячеистого распада (Cr<sub>2</sub>N) в твердом растворе аустенита.

Создана квазибиметаллическая пластина в азотированном сплаве Fe-30Ni-12Cr с использованием сухого трения скольжения. Результатом азотирования становится появление приповерхностного ферромагнитного слоя Fe-Ni аустенита инварного состава с включениями дисперсных нитридов Fe<sub>4</sub>N и CrN. Фрикционная обработка трением скольжения азотированной стороны пластины Fe-30Ni-12Cr приводит к растворению частиц нитридов в приповерхностных азотированных областях сплава. Завершающий отжиг при 600 °С увеличивает объемную долю компоненты, отвечающим бинарному Fe-Ni сплаву инварного состава.

Были проведены измерения стрелы прогиба биметаллической пластины толщиной 60 мкм для различных обработок сплава в интервале температур от – 65 до + 78 °С.

Предложенная схема обработки позволила сконструировать термически устойчивую дисперсно-упрочненную нитридами структуру квазибиметаллической пластины с регулируемой стрелой прогиба.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 15-08-07947) и гранта УрО РАН (№ 15-9-12-45).

## **Синтез и мёссбауэровское исследование наночастиц магнетита в водных коллоидах, предназначенных для струйной печати**

**Черепанов В.М.<sup>1</sup>, Габбасов Р.Р.<sup>1</sup>, Мищенко И.Н.<sup>1,2</sup>, Поликарпов М.А.<sup>1</sup>, Чуев М.А.<sup>1,2</sup>, Юреня А.Ю.<sup>1,3</sup>, Панченко В.Я.<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Физико-технологический институт РАН, Москва (Россия)*

<sup>3</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

cherepanov\_vm@mail.ru

## **Synthesis and Mössbauer study of magnetite nanoparticles in water colloids intended for jet printing**

Cherepanov V.M., Gabbasov R.R., Mischenko I.N., Polikarpov M.A., Chuev M.A., Yurenya A.Y., Panchenko V.Y.

Inks for jet-printing, containing water dispersion of the magnetite nanoparticles were prepared. The inks were ejected on a standard paper at room temperature and external magnetic field  $\sim 3$  kOe by means of a piezoelectric ink jet head. Magnetic properties of the prints were measured using vibration sample magnetometer and by the Mössbauer spectroscopy method. The difference in magnetic behavior of the prints is discussed in connection with interparticle magnetic interactions.

Прогресс в разработке микромеханических дистанционно управляемых устройств для проведения работ внутри человеческого организма сегодня тормозится отсутствием соответствующих малогабаритных источников энергии. Альтернативным путем для решения подобных задач является манипулирование микрообъектами при помощи внешнего магнитного поля. Поэтому разработка технологий создания миниатюрных магнитных объектов является актуальной задачей. Для ее решения все чаще используются аддитивные 3D технологии, позволяющие, например, путем лазерной двухфотонной полимеризации магнитных коллоидов создавать магнитные микротурбины или спиральные пружины с характерными размерами 10 – 30 микрометров. В качестве альтернативного пути рассматривается многослойная струйная печать водных коллоидов.

Цель работы состояла в исследовании перспектив использования технологии струйной печати Epson Micro Piezo для многослойной печати водных коллоидов, содержащих наночастицы магнетита. Магнитные чернила были синтезированы путем соосаждения водных растворов  $\text{FeCl}_2$  и  $\text{FeCl}_3$  в растворе аммиака при интенсивном перемешивании. Далее полученная суспензия осаждалась на магните. Полученный осадок был стабилизирован водным раствором цитрата и разбавлен водой. Печать осуществлялась на струйном принтере Epson L110 во внешнем магнитном поле  $\sim 3$  кЭ. Результаты исследований образцов печати методами мёссбауэровской спектроскопии и магнитометрии обсуждаются.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 14-29-10226-офи-м.



## Structural, magnetic and electronic properties of $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$ nanoparticles studied by Mössbauer and Raman spectroscopy

**Starchikov S.S.<sup>1</sup>, Gervits N.E.<sup>1</sup>, Lin C.-R.<sup>2</sup>, Dmitrieva T.V.<sup>1</sup>, Lyubutin I.S.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*Department of Applied Physics, National Pingtung University, Pingtung (Taiwan)*

sergey.s.starchikov@gmail.com

It is known that magnetite  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles are the most acceptable material for application in cell separation, drug delivery, hyperthermia and as a contrast material in magnetic resonance imaging MRI. The inverse spinel structure of magnetite is very flexible and can absorb a huge variety of ions on several crystallographic positions (on the [B] and (A) crystal sites). Magnetic structure of spinels can be varied in a wide range from ferro-, ferri-, and antiferromagnetic to canted and frustrated magnetic structure in the case of disordered state of magnetic ions. Thus, the properties of cubic spinel nanomaterials can be tuned, by replacing the different ions ( $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$  and others) on the [B] and (A) crystal sites.

Here we report on synthesis of  $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$  nanoparticles with cubic spinel structure by combustion method. The physical properties of the materials were studied by a complex methods, such as XRD, TEM, electron diffraction, EDX, Magnetic measurements, Raman and Mössbauer spectroscopy in temperature range 10 – 300 K. XRD and electron diffraction revealed that the samples have the cubic spinel-type structure (sp. gr.  $Fd\bar{3}m$ ) with an average nanoparticles size of 28.0 nm. Mössbauer spectroscopy was used to evaluate the iron valence and spin states, the magnetic ordering temperature, phase composition of the sample and cation distribution. Basing on XRD, Raman and Mössbauer spectroscopy data we concluded that not only  $\text{FeGa}_2\text{O}_4$  phase but a new phase  $\gamma\text{-FeGaO}_3$  similar to cubic spinel  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  and  $\gamma\text{-Ga}_2\text{O}_3$  is presented in their samples. The low temperature Mössbauer data revealed that  $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$  nanoparticles is non-homogeneous magnetic system with frustrated interactions specific of spin-glasses with ordering temperature at about 26 K. The transformation of the shape of low temperature paramagnetic  $\text{Fe}^{2+}$  doublet components was found under heating from 30 K to room temperature. This transformation occurs due to unusual temperature behavior of the  $\text{Fe}^{2+}$  ion quadrupole splitting at tetrahedral sites, which was initiated by the Jahn-Teller effect. The distortions of tetrahedral  $\text{Fe}^{2+}$  iron environment due to J-T effect was found in many spinels containing  $\text{Fe}^{2+}$  ions in tetrahedral coordination [1], however, to our knowledge, this effect was not observed in bulk  $\text{FeGa}_2\text{O}_4$  material.

Support by the Russian Scientific Foundation (Project #14-12-00848) is acknowledged.

### REFERENCES

1. Ono K. Mössbauer study of  $\text{Fe}^{2+}$  in some normal spinels / K. Ono, A. Ito, Y. Syono // Phys. Lett. – 1966. – V. 19. – №. 8. – P. 620-621.

## Исследования магнитных пленок для сверхвысокоплотной записи информации

**Валиуллин А.А.<sup>1</sup>, Камзин А.С.<sup>2</sup>, Тагиров. Л.Р.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург (Россия)  
fess98@rambler.ru

### Researching of properties of magnetic thin films for recorders and storage devices

Valiullin A.A., Kamzin A.S., Tagirov L.R.

A great many studies of thin film magnetic materials focus on increasing their magnetic data density. The data density is often raised by minimizing the size of grains. However, the minimum possible size of granules is limited by the emergence of the superparamagnetic effect, which prevents the magnetic data density from increasing. The exchange interaction between granules is another limiting factor. Various methods are used to overcome these limitations.

Многие исследования магнитных материалов, связанные с созданием тонких пленок, направлены на повышение плотности магнитной записи информации. Повышение плотности записи достигается за счет минимизации размеров зерен. Однако уменьшение размеров гранул ограничено возникновением суперпарамагнитного эффекта. Другим ограничением для повышения плотности записи является обменное взаимодействие между гранулами. Для преодоления этих ограничений изучены различные способы создания специальных структур и получены следующие результаты:

1. Ориентацией легкой оси намагничивания наночастиц в тонкой пленке фазы  $L1_0$  можно манипулировать при осаждении с помощью внешнего магнитного поля. Методика конденсации плазмы в газовой фазе с использованием внешних магнитных полей, позволяет легко получить тонкие пленки на основе FePt состояния  $L1_0$  с необходимой магнитной структурой, требуемой для высокоплотной магнитной записи информации.

2. Одним из наиболее перспективных методов увеличения плотности магнитной записи является использование структурированного носителя информации. В этом случае в пленке создаются ферромагнитные гранулы (наноточки) одинаковых размеров. Добавление родия (Rh) в сплав FePt позволяет оптимизировать магнитные свойства тонких пленок без существенного уменьшения энергии магнитокристаллической анизотропии, что позволяет использовать данный состав в качестве структурированного носителя информации.

3. В результате исследований синтезированных тонких пленок FeCoAlON установлено, что пленки толщиной 320 nm обладают одноосной перпендикулярной анизотропией, что делает их пригодными для использования в качестве магнитных головок записи/чтения информации со сверхвысокой плотностью на магнитных носителях.

## Исследование динамических и фазовых переходов в системе «железо-пленки воды-поверхность наноглин»

Залуцкий А.А., Седьмов Н.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.

*Ярославский государственный технический университет, Ярославль (Россия)*  
zalutskii@mail.ru

### The study of dynamic and phase transitions in the «iron-water film-surface nanoclays»

Zalutskii A.A., Sed'mov N.A., Shkolnikov E.N., Morozov V.V.

The report presents the results of studies of phase transitions in water nanofilms adsorbed in the clay. For the first time from the analysis of the temperature dependence of the parameters of the spectra the ratio ortho/para-spin isomers in the frozen water and the localization of the Mössbauer probe on the surface of natural aluminum silicates have been determined.

Природные наносистемы (слоистые алюмосиликаты) недостаточно изучены физическими методами и представляют интерес, как пример особого способа организации твёрдого тела, так и как готовые (недорогие по себестоимости) материалы для наноиндустрии.

В докладе рассматривается композиционное представление, заключающееся в том, что силикатные слои глины и межслоевые комплексы железа в совокупности с водой образуют единый комплекс. Для анализа «структуры» адсорбированной минералом сетки воды применена зондовая методика, разработанная на базе мёссбауэровского изотопа  $^{57}\text{Fe}$  в двух формах ( $\text{Fe}^{2+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$ ). Вода в наномасштабах представляет собой флуктуирующую смесь кластеров с тетраэдрической структурой и ассоциатов с нарушенными водородными связями. Физическая причина такой структурной дифференциации обусловлена наличием у молекулы воды двух ядерных спин-изомеров. Впервые методом мёссбауэровской спектроскопии (МС) предпринята попытка количественной оценки отношения орто/пара спин-изомеров ( $R$ ) в «переохлаждённой» воде. Полученное отличие величины  $R$  от равновесного значения (3:1) указывает на неустойчивое метастабильное состояние наноплёнок воды на поверхности глины. Температурная трансформация мёссбауэровских спектров исследуемой системы качественно объясняется в рамках традиционных моделей, адекватно описываемых фазовые переходы двух типов («порядок-беспорядок» и «порядок-порядок»).

Для анализа неравновесного перехода «либрация-вращение» в зависимости от толщины адсорбированной плёнки  $\text{H}_2\text{O}$  использованы квантовый («бинарный» механизм) и классический («свободный» механизм) подходы. Установленные методом МС значения критических температур  $T_c$  ( $-23; -6$  °C) удовлетворяют резонансному условию равенства кинетической энергии орто/пара спиновых изомеров  $\text{H}_2\text{O}$  и энергии их вращательного кванта.

## Фазовый состав и магнитные свойства Fe-Co и Fe-Ni нанопроволок, полученных в порах трековых мембран

Перунов И.В.<sup>1</sup>, Фролов К.В.<sup>1</sup>, Коротков В.В.<sup>1,2</sup>, Бедин С.А.<sup>1,3</sup>, Загорский Д.Л.<sup>1</sup>, Любутин И.С.<sup>1</sup>, Хмеленин Д.Н.<sup>1</sup>, Артёмов В.В.<sup>1</sup>, Сульянов С.Н.<sup>1</sup>, Чуев М.А.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва (Россия)

<sup>3</sup>Московский педагогический государственный университет, Москва (Россия)

<sup>4</sup>Физико-технологический институт РАН, Москва (Россия)

qazqwer1@mail.ru, green@crys.ras.ru

## Phase composition and magnetic properties of Fe-Co and Fe-Ni nanowires, obtained in pores of the track-etched membranes

Perunov I.V., Frolov K.V., Korotkov V.V., Bedin S.A., Zagorsky D.L., Lyubutin I.S., Khmelenin D.N., Artemov V.V., Sulyanov S.N., Chuev M.A.

The phase composition and magnetic properties of the arrays of iron-cobalt and iron-nickel alloy nanowires obtained by the electrochemical deposition into pores of the polymer track-etched membranes were studied. It was revealed that the phase composition of nanowires consists of *bcc* and *fcc* cubic phases of Fe-Co and Fe-Ni alloys. All samples of nanowires arrays were magnetically ordered and have preferred orientation of the magnetization, which was formed without application of an external magnetic field during the electrodeposition.

В данной работе методами электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, вибрационной магнитометрии и мёссбауэровской спектроскопии на ядрах <sup>57</sup>Fe были исследованы фазовый состав и магнитные свойства массивов Fe-Co и Fe-Ni нанопроволок, полученных электрохимическим осаждением металлов из раствора в поры полимерных полиэтилентерефталатных трековых мембран при различных условиях. Установлено, что диаметр нанопроволок составлял 30 – 200 нм, длина около 10 мкм, поверхностная плотность нанопроволок в массиве – около 10<sup>8</sup> см<sup>-2</sup>, среднее расстояние между нанопроволоками – около 1 мкм. Обнаружено, что фазовый состав нанопроволок представляет собой комбинацию ОЦК и ГЦК фаз Fe-Co и Fe-Ni сплавов с различным локальным окружением ионов железа. Все экспериментальные образцы массивов нанопроволок были магнитоупорядочены и демонстрировали выделенную ориентацию намагниченности внутри нанопроволок, которая спонтанно формируется в процессе электроосаждения без приложения внешнего магнитного поля. Направление намагниченности зависит от условий синтеза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-08-04949), РНФ (проект № 14-12-00848), с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН при финансовой поддержке Минобрнауки РФ.

## Исследование Fe и Fe-Co нанотрубок в полимерных ионно-трековых мембранах

Русаков В.С.<sup>1</sup>, Кадыржанов К.К.<sup>2</sup>, Козловский А.Л.<sup>2</sup>, Киселева Т.Ю.<sup>1</sup>,  
Здоровец М.В.<sup>2</sup>, Фадеев М.С.<sup>1</sup>, Лукьянова Е.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана (Казахстан)

rusakov@phys.msu.ru

### Study of Fe and Fe-Co nanotubes in polymer ion-track membranes

Rusakov V.S., Kadyrzhanov K.K., Kozlovskiy A.L., Kiseleva T.Yu.,  
Zdorovets M.V., Fadeev M.C., Luk'yanova E.N.

The iron and iron-cobalt nanostructures synthesized in polymer ion-track membranes were studied by Mössbauer spectroscopy with attraction data of scanning electron microscopy, energy dispersive analysis and X-ray diffraction. The obtained nanostructures are single-phase with a high degree of polycrystallinity  $Fe_{1-x}Co_x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) nanotubes with a *bcc* structure with a length of 12  $\mu\text{m}$ , diameter of  $110 \pm 3$  nm and a wall thickness of  $21 \pm 2$  nm. For Fe nanotubes is observed a random distribution of directions of magnetic moments of Fe atoms, and Fe-Co nanotubes – magnetic texture along the nanotubes axis. The substitution of Fe atom to the Co atom in the immediate environment of the Fe atom results in a significant increase of the hyperfine magnetic field and a small decrease of the isomer shift. Two mechanisms were revealed and the separation of the contributions to the changes of hyperfine magnetic field and isomer shift with the change in the concentration of Co atoms were carried out.

Методами мёссбауэровской спектроскопии с привлечением данных растровой электронной микроскопии, энергодисперсионного анализа и рентгеновской дифрактометрии исследованы железные и железо-кобальтовые наноструктуры, синтезированные в полимерных ионно-трековых мембранах. Полученные наноструктуры представляют собой однофазные с высокой степенью поликристалличности  $Fe_{1-x}Co_x$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) нанотрубки с ОЦК структурой длиной 12 мкм, диаметром  $110 \pm 3$  нм и толщиной стенки  $21 \pm 2$  нм. Для Fe нанотрубок наблюдается случайное распределение направлений магнитных моментов атомов Fe, а для Fe-Co нанотрубок – магнитная текстура вдоль оси нанотрубок. Замещение атома Fe на атом Co в ближайшем окружении атома Fe приводит к заметному увеличению сверхтонкого магнитного поля на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  (на  $8 \div 12$  кЭ) и небольшому уменьшению сдвига мёссбауэровской линии (на  $\Delta\delta \sim 0.01$  мм/с). Выявлено два механизма, и проведено разделение вкладов в изменения сверхтонкого магнитного поля и сдвига мёссбауэровской линии с изменением концентрации атомов Co.

Работа выполнена в рамках проекта Министерства образования и науки Республики Казахстан №45 от 12.02.2015 г.

## Мёссбауэровское исследование поверхности наночастиц core-shell типа

**Абдуллин А.Ф.<sup>1</sup>, Пятаев А.В.<sup>1</sup>, Домрачева Н.Е.<sup>2</sup>, Груздев М.С.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Казанский федеральный университет, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань (Россия)

<sup>3</sup>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново (Россия)

ayazik@bk.ru

### Mössbauer study of the surface of core-shell type nanoparticles

Abdullin A.F., Pyataev A.V., Domracheva N.E., Gruzdev M.S.

The properties of the surface layer of core-shell nanoparticles ( $\langle d \rangle \approx 2.5 \pm 0.5$  nm) incorporated into the matrix of macromolecules of 3,4-bis(decyloxybenzoyl)poly(propylene imine) derivative of the second generation are studied by Mössbauer spectroscopy at low temperatures. The spin states, the details of the phonon spectrum and the Debye temperature of surface layer atoms are discussed.

В работе исследован композиционный материал на базе наночастиц core( $\alpha$ -Fe)–shell( $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) типа ( $\langle d \rangle \approx 2.5 \pm 0.5$  нм), инкапсулированных в макромолекулах жидкокристаллического дендримера второй генерации производного 3,4-бис-децилоксибензоил поли(пропилен имина) [1]. Продемонстрировано проявление низкоспиновых свойств в поверхностном моноатомном слое высокоспинового наноразмерного материала (дублет со средним значением квадрупольного расщепления 2.93 мм/с и изомерного сдвига 0.21 мм/с на рис. 1). Оценка температуры Дебая этих атомов даёт значение  $56 \pm 5$  К. В работе показано, что механизм возникновения низкоспиновых центров – “поверхностный”, а не “объёмный”, как для традиционных спин-кроссовер систем. Доля атомов в низкоспиновом состоянии слабо зависит от температуры и обусловлена только относительным количеством атомов поверхности, которые отличаются от объёмного материала свойствами фононного спектра.

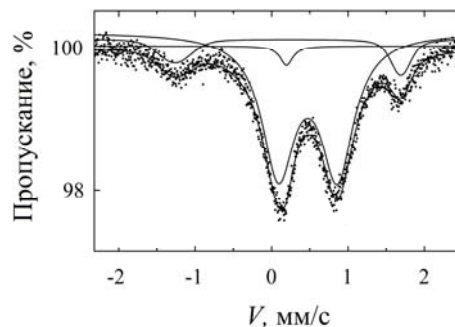


Рис. 1. Мёссбауэровский спектр наночастиц core-shell типа, полученный при температуре 79 К

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН № 24 «Фундаментальные основы технологий наноструктур и материалов».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Abdullin A.F.* Mössbauer study of the surface of core-shell type nanoparticles / A.F. Abdullin, A.V. Pyataev, N.E. Domracheva, M.S. Gruzdev // J. Surf. Invest. – 2016. – V. 10. – №. 1. – P. 35-38.

## Mössbauer and Raman spectroscopy study of graphene - magnetite nanocomposites

**Baskakov A.O.<sup>1</sup>, Starchikov S.S.<sup>1</sup>, Shih K.-Ya.<sup>2</sup>, Lin C.-R.<sup>2</sup>, Lyubutin I.S.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*Department of Applied Physics, National Pingtung University, Pingtung (Taiwan)*

arseniybaskakov@gmail.com

The new discovered allotropic 2D form of carbon – graphene (G) gained much interest from different scientific groups in the last decade due to its unique properties, such as high electrical conductivity, mechanical, optical and thermal properties [1]. Therefore, G attracts much attention in the fields of physics, biology, chemistry, medicine and material science. Nanocomposites of G-inorganic nanoparticles (NPs) have opened up a completely new field in the study of graphene. The composites of G modified with magnetite (G-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles) can be very promising in the terms of their application in the field of targeted drug delivery and materials for anodes in lithium-ion batteries due to special properties of both graphene and magnetic nanoparticles.

Mössbauer study of such composites could provide an important information about specific interaction between nanoparticles and graphene, the particular structural and magnetic properties determined by nanoparticles composition, size and specifics of synthesis. In addition, with such powerful investigation methods as XRD and Raman spectroscopy (that is extremely useful while studying graphene structures and iron oxides) we can gain much information about the G-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanocomposites and its properties.

In our study the series of graphene-magnetite (G-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) and graphene-oxide-magnetite (GO-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanocomposites were synthesized at different conditions, and the Mössbauer and Raman spectra were investigated at different temperatures. It was found that the maghemite (gamma-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) phase is the present in all samples along with magnetite phase. In the magnetic field distribution, the Mössbauer components with low magnetic fields values are present, which can be connected to the surface effect in nanoparticles and can probably contain information about interaction between graphene and magnetic nanoparticles. The presence of the paramagnetic doublet component can be explained by superparamagnetic properties of small particles (with size < 10 nm), which can be present in the sample due to the particles' size distribution.

This study is supported by the Russian Scientific Foundation (Project #14-12-00848).

### REFERENCES

1. *Singh V.* Graphene based materials: Past, present and future / V. Singha, D. Jounga, L. Zhaia, S. Das, S.I. Khondakera, S. Seal // Prog. Mat. Sci. – 2011. – V. 56. – №8. – P. 1178–1271.

## Distribution of condensate functions in superconducting triplet spin-valve switching modes

**Gaifullin R.R.<sup>1</sup>, Deminov R.G.<sup>1</sup>, Tagirov L.R.<sup>1</sup>, Karminskaya T.Yu.<sup>2</sup>, Kupriyanov M.Yu.<sup>2,3,1</sup>, Fominov Ya.V.<sup>4,3</sup> and Golubov A.A.<sup>5,3</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow State University, Moscow (Russia)*

<sup>3</sup>*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny (Russia)*

<sup>4</sup>*L.D. Landau Institute for Theoretical Physics RAS, Chernogolovka (Russia)*

<sup>5</sup>*Faculty of Science and Technology and MESA+ Institute of Nanotechnology,*

*University of Twente, Enschede (Netherlands)*

gaifullin.rashid@gmail.com

We investigate SF1F2 and F1SF2 structures (S is a singlet superconductor, F1 and F2 are ferromagnetic metals, identical in our case), where the long-range triplet superconducting pairing is generated at canted magnetizations of the F layers [1]. Earlier we demonstrated that transition temperature  $T_c$  in the semi-infinite SF1F2 structures can be a non-monotonic function of the angle  $\alpha$  between magnetizations of the two F layers [2], against the monotonic  $T_c(\alpha)$  behavior obtained for the F1SF2 trilayers [3]. It was shown a short time ago [4] the existence of the anomalous dependence of the spin-triplet pairing correlations on the angle  $\alpha$  in SF1F2 structures in a limit of thin F layers. We examine comparatively the spin-singlet and spin-triplet pairing distributions and amplitudes as a function of the layers thicknesses at different values of the angle  $\alpha$  in SF1F2 and F1SF2 structures to clarify which one of the pairings and how may impact on the superconducting spin-valve switching modes in the both heterostructures.

The support by RFBR (grants No. 16-02-01171-a, 14-02-31002-mol\_a, 15-32-20362-bel\_a\_ved), DFG and by the Program of Competitive Growth of Kazan Federal University is gratefully acknowledged.

### REFERENCES

1. *Bergeret F.S.* Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures / F.S. Bergeret, A.F. Volkov, K.B. Efetov // *Rev. Mod. Phys.* – 2005. – V. 77. – P. 1321–1373.
2. *Fominov Ya.V.* Superconducting triplet spin valve / Ya.V. Fominov et al. // *JETP Lett.* – 2010. – V. 91. – P. 308–313.
3. *Fominov Ya.V.* Triplet proximity effect in FSF trilayers / Ya.V. Fominov, A.A. Golubov, M.Yu. Kupriyanov // *JETP Lett.* – 2003. – V. 77. – P. 510–515.
4. *Karminskaya T.Yu.* Anomalous proximity effect in spin-valve superconductor/ferromagnetic metal/ferromagnetic metal structures / T.Yu. Karminskaya, A.A. Golubov, M.Yu. Kupriyanov // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 84. – P. 064531.



# Magnetic, structural and electronic properties of $\text{FeGa}_2\text{O}_4$ - $\text{FeGaO}_3$ nanocomposites

**Gervits N.E.<sup>1</sup>, Starchikov S.S.<sup>1</sup>, Lin C.-R.<sup>2</sup>, Lyubutin I.S.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow (Russia)

<sup>2</sup>Department of Applied Physics, National Pingtung University, Pingtung (Taiwan)

ngervits@gmail.com

Iron gallate nanoparticles are very prospective material which can find applications in medicine and electronics due to its specific magnetic and magneto-optical features. The combustion method was used to prepare a precursor powder of iron-gallium oxide compound which further was heat treated in order to obtain the  $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$  nanoparticles. The Mössbauer spectroscopy revealed only ferric  $\text{Fe}^{3+}$  ions in the smallest 1.8 nm particles implying a  $\text{Fe}^{3+}_{1-x}\text{Ga}^{3+}_{1+x}\text{O}_3$  composition. The cation distribution in the pure  $\text{FeGa}_2\text{O}_4$  compound obtained from the Mössbauer data at room temperature can be given as  $(\text{Fe}^{2+}_{0.76}\text{Ga}^{3+}_{0.24})^{\text{tet}}[\text{Fe}^{2+}_{0.24}\text{Ga}^{3+}_{1.76}]^{\text{oct}}\text{O}_4$ .

Magnetic measurements reveal hysteresis loops in  $M(H)$  only at lowest temperature of 5 K. The maximum in the ZFC magnetization curves appears in all samples at temperatures of about 20–30 K which are only slightly dependent on the particle size. At high temperatures ( $T \gg T_{\text{sg}}$ ) the  $I/M(T)$  dependence for the 1.8 and 28.0 nm particles follows the Curie-Weiss law, and the estimated  $\Theta_C$  values are rather high and positive, which indicate the *ferromagnetic* interaction. Because of a large value of  $\Theta_C$  and small value of  $T_{\text{sg}}$ , the magnetic frustration parameter  $f$  is rather high (up to 7), which supports spin-glass type of magnetic ordering. The low temperature Mössbauer data (Fig. 1)

reveal magnetic ordering of Fe ions in all samples with the magnetic transition temperatures from 20 to 26 K depending on the nanoparticle size. At low temperatures the  $\langle H_{\text{hf}} \rangle(T)$  dependence is well approximated by a linear law which is a characteristic of collective magnetic excitation which is a specific of the spin-glass properties rather than the superparamagnetic relaxation [1].

Support by the Russian Scientific Foundation (Project #14-12-00848) is acknowledged.

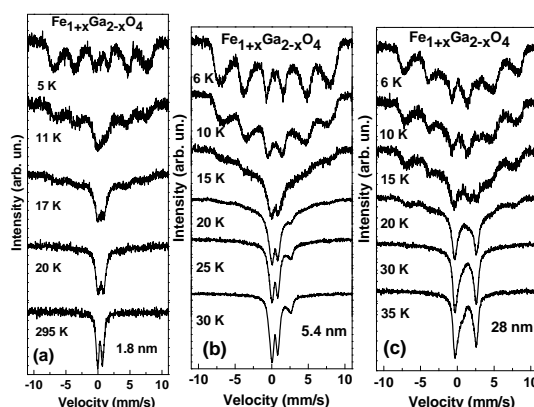


Fig. 1. Representative Mössbauer spectra of  $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_{2-x}\text{O}_4$  nanoparticles in the temperature region of magnetic transition.

## REFERENCES

1. Mørup S. A new interpretation of Mössbauer spectra of microcrystalline goethite: “Superferromagnetism” or “super-spin-glass” behaviour? / S. Mørup, M. B. Madsen, J. Franck, J. Villadsen, C. J. Koch // J. Magn. Magn. Mater. – 1983. – V. 40. – № 1-2. – P. 163–174.

## **Мёссбауэровский анализ структуры в области контактного нагружения высокоазотистой хромо-марганцевой аустенитной стали**

**Заматовский А.Е., Шабашов В.А., Коршунов Л.Г.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
zamatovsky@imp.uran.ru

## **Mössbauer analysis of the structure in contact loading of high chromium-manganese austenitic steel**

**Zamatovsky A.E., Shabashov V.A., Korshunov L.G.**

Mössbauer spectroscopic study of structural phase transitions in austenitic steels Fe-22Mn-18Cr-0.8N in the surface layers during friction and wear products, as well as the high pressure torsion in Bridgman anvils.

Проведено мёссбауэровское исследование структурно-фазовых переходов в аустенитной стали Fe-22Mn-18Cr-0.8N в поверхностных слоях при трении скольжения и продуктах износа, а также при сдвиге под давлением в наковальнях Бриджмена.

После деформации сдвигом в объёме образца, трения скольжения в поверхностных слоях и продуктах износа происходит растворение нитридов Cr<sub>2</sub>N и увеличение среднего содержания азота в аустенитной матрице. В продуктах износа стали формируется значительное количество α-фазы. Одновременно в поверхностных слоях и особенно в продуктах износа образуется значительное количество антиферромагнитного аустенита вследствие обеднения части металлической матрицы хромом и азотом.

Сделан вывод, что в состаренной стали Fe-22Mn-18Cr-0.8N трение, как и сдвиг под давлением создаёт условия для растворения продуктов ячеистого распада (Cr<sub>2</sub>N) с образованием вторичных нитридов. Результирующая структура формируется в результате конкуренции деформационного растворения и динамического старения в стали. Неоднородность распределения азота и хрома в матрице объясняется неоднородностью условий (температуры и скорости деформации) в различных областях поверхности. Контактные растягивающие напряжения способствуют развитию в метастабильной стали γ→α превращений, инициирующих образование и распространение микротрещин в поверхностных слоях.

Работа выполнена в рамках темы «Структура» (грант УрО РАН (№ 15-9-12-45)) и финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-08-07947).

## Мёссбауэровские исследования магнитных свойств тонких пленок оксида цинка, имплантированных ионами железа

**Зиннатуллин А.Л.<sup>1</sup>, Гумаров А.И.<sup>1</sup>, Гильмутдинов И.Ф.<sup>1</sup>, Валеев В.Ф.<sup>2</sup>,  
Хайбуллин Р.И.<sup>1,2</sup>, Вагизов Ф.Г.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань (Россия)

almaz.zinnatullin@gmail.com

### Mössbauer studies of magnetic properties of iron implanted zinc oxide thin films

Zinnatullin A.L., Gumarov A.I., Gilmutdinov I.F., Valeev V.F., Khaibullin R.I., Vagizov F.G.

In this work we investigated magnetic properties of ZnO thin films implanted with iron ions with energy 40 keV and ion fluence of  $1.25 \cdot 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup> and  $1.5 \cdot 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup>. A sample was studied by conversion electron Mössbauer spectroscopy, vibrating sample magnetometry and X-ray photoelectron spectroscopy.

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) являются активно исследуемыми материалами. Такие материалы проявляют одновременно полупроводниковые и магнитные свойства. На их базе предполагается создание устройств спинтроники – спиновых полевых транзисторов, которые позволят управлять током электронов без рассеяния направления их спина [1]. В работе [2] теоретически предположили, что оксид цинка, легированный ионами переходных металлов, может проявлять ферромагнитные свойства даже при температурах выше комнатной. После этого было опубликовано большое количество экспериментальных работ, что говорит об актуальности проблемы.

В настоящей работе исследованы тонкие пленки оксида цинка, имплантированные ионами железа с энергией 40 кэВ и дозами  $1.25 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> и  $1.5 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>. Имплантированные и отожженный впоследствии при температуре 500 °С образцы исследовались методами мёссбауэровской спектроскопии конверсионных электронов, вибрационной магнитометрии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Приводится анализ результатов исследований магнитных свойств и микроструктуры.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Wolf S.* Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future / S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman et al. // *Science*. – 2001. – V. 294. – № 5546. - P. 1488-1495.
2. *Dietl T.* Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors / T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura et al. // *Science*. – 2000. – V. 287. –P. 1019-2022.

## Микроструктура и магнитные свойства пленок титаната стронция, имплантированного железом

Латыпова Р.И.<sup>1</sup>, Дулов Е.Н.<sup>1</sup>, Хайбуллин Р.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казанский федеральный университет, Казань (Российская Федерация)

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. Завойского, Казань (Российская Федерация)

roilatypova@gmail.com

### Microstructure and magnetic properties of strontium titanate implanted with iron ions

Latypova R.I., Dulov E.N., Khaibullin R.I.

Studies of microstructure and magnetic properties of thin magnetic films were synthesized by means of implantation of iron ions into single-crystalline substrates of strontium titanate have been carried out.

С использованием магнитно-ориентационной мёссбауэровской спектроскопии и магнитных измерений выполнены исследования тонких пленок, полученных ионной имплантацией железа в монокристалл титаната стронция (толщина имплантированного слоя 60 нм [1]). Обработка спектров, полученных при нормальном и касательном падении пучка  $\gamma$ -квантов на плоскость пленок, показала отсутствие магнитного порядка в образце с дозой железа  $D = 0.75 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> и ферромагнитный порядок в образце с дозой  $D = 1.5 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>.

На рисунке показан разностный спектр высокодозного образца, полученный линейной комбинацией спектров при нормальном и касательном падении пучка  $\gamma$ -квантов.

Были выполнены мёссбауэровские измерения при наложении внешнего магнитного поля величиной в 3 кЭ перпендикулярно плоскости пленок. Образец с дозой железа  $D = 0.75 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> показал наличие эффективного магнитного поля плоскостной анизотропии порядка 1 кЭ, образец с дозой  $D = 1.5 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> – 10 кЭ.

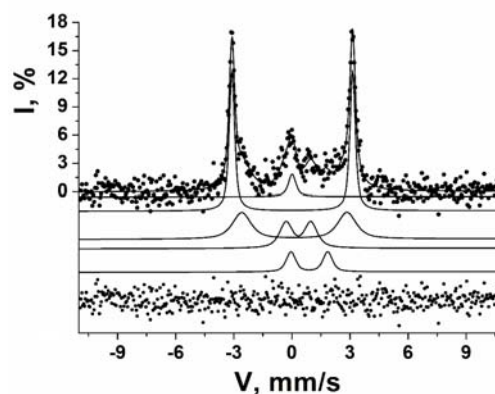


Рис. 1. Разностный спектр высокодозного образца  $\text{SrTiO}_3 \leftarrow \text{Fe}^+$

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Dulov E.N. Magnetic phase composition of strontium titanate implanted with iron ions / E. N. Dulov, N. G. Ivoilov, O. A. Strebkov, et al. // Mater. Res. Bull. – 2011. – V. 46. – № 12. – P. 2304–2307.

## Анализ структуры и магнитно-фазового состава плёнок $^{57}\text{Fe}$ сформированных по технологии ионно-стимулированного осаждения

**Лядов Н.М.<sup>1</sup>, Базаров В.В.<sup>1</sup>, Вагизов Ф.Г.<sup>2</sup>, Шустов В.А.<sup>1</sup>, Дулов Е.Н.<sup>2</sup>, Носков А.И.<sup>3</sup>, Хайбуллин Р.И.<sup>1</sup>, Файзрахманов И.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Казанский федеральный университет, Казань (Россия)

<sup>3</sup>Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева, Казань (Россия)  
nik061287@mail.ru

### Analysis of the structure and magnetic phase composition of the films grown by ion-beam assisted deposition technology

Lyadov N.M., Bazarov V.V., Vagizov F.G., Shustov V.A., Dulov E.N., Noskov A.I., Khaibullin R.I., Faizrahmanov I.A.

The main aim of our work – the studies of phase composition and magnetic properties of the thin iron films obtained by ion beam assisted deposition, and the same films is then subjected to thermal annealing under vacuum. Thin iron films  $^{57}\text{Fe}$  with 120 nm thickness has deposited on glass and element-phase composition and magnetic properties both as-deposited and subsequently annealed in vacuum films has been investigated. As-deposited iron films  $^{57}\text{Fe}$  are in a stressful thermodynamically unstable state with nanocrystalline structure containing nanosized inclusions of  $\alpha$ -phase iron. Strong contribution of perpendicular magnetic anisotropy in magnetic behaviour of  $^{57}\text{Fe}$  films is observed due to stress in films which become stress-free after thermal annealing only.

Анализ представленных результатов исследования показывает, что тонкие пленки железа  $^{57}\text{Fe}$ , полученные методом ионно-стимулированного осаждения на стеклянной подложке, проявляют ряд особенностей в структуре и магнитных характеристиках. Исходно-осажденные пленки имеют нанокристаллическую структуру, представляющую собой термодинамически-нестабильную при нормальных условиях аморфную среду (фазу) железа с наноразмерными ( $\sim 10$  нм) кристаллическими включениями  $\alpha$ -фазы Fe. Пленки находятся в напряженном состоянии, которое оказывает существенное влияние на кривые намагничивания пленок и проявляется в форме одноосной магнитной анизотропии. Последующий термический отжиг в условиях вакуума стимулирует кристаллизацию всего объема пленки и размеры кристаллитов  $\alpha$ -фазы Fe возрастают до  $\sim 20$  нм. Остаточные механические напряжения в пленке снимаются и отожженные образцы проявляют типичное для кристаллических пленок железа магнитное поведение.

## Исследование состояния имплантированных атомов $^{57}\text{Fe}$ в металлических матрицах

Озерной А.Н., Верещак М.Ф., Манакова И.А., Тлеубергенов Ж.К.

*Институт ядерной физики, Алматы (Казахстан)*

manakova@inp.kz

### Study of $^{57}\text{Fe}$ implanted atoms state in metal matrix

Ozernoy A.N., Vereshchak M.F., Manakova I.A., Tleubergenov Zh.K.

This paper provides the study of the processes of surface layers structure formation using the conversion Mössbauer spectroscopy during  $^{57}\text{Fe}$  ion implantation in metallic foil of beryllium, aluminum, copper, zirconium and tantalum.

В настоящей работе с помощью конверсионной мёссбауэровской спектроскопии (КЭМС) исследовались процессы формирования структуры поверхностных слоев при ионной имплантации  $^{57}\text{Fe}$  в металлические фольги бериллия, алюминия, меди, циркония и тантала. Имплантация ионов  $^{57}\text{Fe}$  в фольги размером  $10 \times 10 \times 0.05$  мм осуществлялась на электростатическом перезарядном ускорителе тяжелых ионов УКП-2-1 ИЯФ РК. Плотность ионного тока составляла 20 нА. Энергия непрерывного потока ионов 50 кэВ, флюенс варьировался от  $5 \cdot 10^{16}$  до  $4 \cdot 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>.

Локальное окружение атомов железа по завершении процесса имплантации определяли методом КЭМС на спектрометре MS-110Em при комнатной температуре. Источником  $\gamma$ -квантов служил  $^{57}\text{Co}$  в матрице хрома. Анализ и обработку мёссбауэровских спектров проводили с помощью программы SpectrRelax. Для расчета степени воздействия ионного пучка на кристаллическую решетку матрицы использовали программу STRIM-2008. Условия облучения ионами железа были выбраны так, чтобы глубина проникновения ионов вглубь подложки была соизмерима с толщиной, доступной для исследования методом КЭМС (~ 100 нм). Элементный состав приповерхностного слоя определяли с помощью электронного растрового микроскопа JEOL JSM-6610.

КЭМС-спектры состоят из синглета и дублета, что указывает на два состояния имплантированных атомов железа в подложках. Резонансные спектры ионно-имплантированных слоев не выявили присутствия в них кристаллического  $\alpha$ -Fe. Одиночная линия обусловлена атомами Fe, не имеющими в ближайшем окружении собственных атомов (мономеры железа). Мёссбауэровские параметры дублетов близки, что указывает на отсутствие взаимодействия имплантированных атомов с кристаллической решеткой матрицы. Можно предположить, что в ходе облучения появляется углеродная пленка, способствующая образованию мелкодисперсных карбидов железа в приповерхностном слое облученных материалов.

## Конверсионная электронная мёссбауэровская спектроскопия металлических нанокompозитов

**Тлеубергенов Ж.К., Манакова И.А., Озерной А.Н., Верещак М.Ф.**

*Институт ядерной физики, Алматы (Казахстан)*

manakova@inp.kz

### Conversion electron Mössbauer spectroscopy of metallic nanocomposites

Manakova I.A., Tleubergenov Zh.K., Ozernoy A.N., Vereshchak M.F.

This paper presents the results of the studies of nanoscale composite coatings produced by deposition technology of two metals on the metal substrates.

В настоящей работе представлены результаты исследований наноразмерных композитных покрытий, полученных с помощью разработанной оригинальной технологии осаждения двух металлов на подложки с возможностью регулирования соотношений компонентов при температурах значительно ниже температуры плавления. Осаждение осуществлялось в вакууме из двух одновременно работающих источников - магнетрона и термовакуумного испарителя. В качестве мишеней в магнетронной технологии использовали алюминий, хром, медь и тантал. Термовакуумный испаритель обеспечивал в камере магнетрона необходимое давление паров обогащенного до 92 %  $^{57}\text{Fe}$ . Соотношение металлов в пленках можно было варьировать, изменяя скорость распыления. В качестве подложки использовали алюминиевую или медную фольгу, что не оказывало влияния на качество и структурное состояние наносимых покрытий, т.е. не обнаружено химическое взаимодействие подложка-покрытие.

Структурно-фазовое состояние зондовых мёссбауэровских атомов  $^{57}\text{Fe}$  получали с помощью метода КЭМС с регистрацией электронов внутренней конверсии (Рис. 1.). Полученные экспериментальные данные свидетельствуют об образовании в результате термофлуктуационного плавления твердого раствора железа в матрицах материалов мишеней.

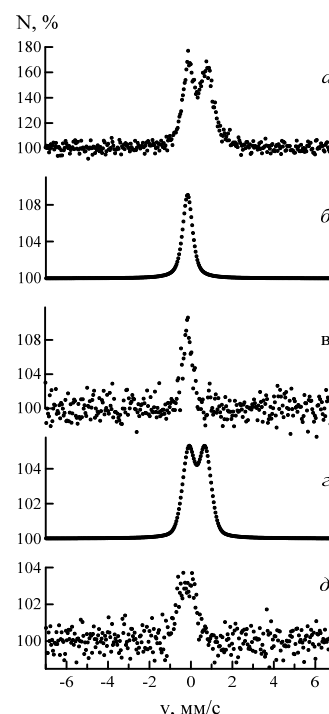


Рис. 1. КЭМС-спектры на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  нанокompозитных пленочных покрытий  
а)  $\text{Al}+^{57}\text{Fe}$  на  $\text{Cu}$  подложке;  
б)  $\text{Cr}+^{57}\text{Fe}$  на  $\text{Cu}$  подложке;  
в)  $\text{Cr}+^{57}\text{Fe}$  на  $\text{Al}$  подложке;  
г)  $\text{Cu}+^{57}\text{Fe}$  на  $\text{Cu}$  подложке;  
д)  $\text{Ta}+^{57}\text{Fe}$  на  $\text{Cu}$  подложке.

## Tunnel magnetoresistance related with nanoparticle size distribution in magnetic tunnel junctions

**Useinov A.N.<sup>1,2</sup>, Esmaili A.<sup>2</sup>, Lai C.-H.<sup>1</sup>, Useinov N.K.<sup>2</sup>, Lin H.-H.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*MSE & Phys. departments, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan)*

<sup>2</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

nuseinov@mail.ru

The simulations of the tunnel magnetoresistance (TMR) in magnetic tunnel junctions with embedded nanoparticles (NPs) were done in the range of direct electron tunneling model in the system FM/I/NP/I/FM, where FM is a ferromagnet and thickness of the I/NP/I varied within 1 – 5 nm, (I) is an insulating layer 1 nm. The simulation includes different NP distributions by NP size (with diameters  $d = 0.2\text{--}3.0$  nm), quantum well (QW) states and small temperature impacts.

The model can explain the experimental observations of the TMR suppression at zero bias, which depends on the NP size distribution at low temperature [1]. The electron transport through NPs is closely similar to the double barrier and point-like contact models. The present results were developed on the basis of our previous model, where only averaged NP size per tunneling cell was considered [2].

The figure 1 shows example of the TMR suppression with NP dispersion (inset), where electrons tunnel through NPs with  $d < 1.7$  nm having QW states  $n = 1$ , and for NPs  $d > 1.7$  nm,  $n = 2$  at  $T = 2.5$  K.

The model can serve as a basement for tuning of the TMR amplitude, bias-dependence of TMR in novel MTJ-based structures. The presented data are in high contrast to the Coulomb blockade and Kondo-assisted consecutive tunneling models [1]. Magnetic states of the embedded NPs made of metallic iron or an iron alloy can be checked making use of Mössbauer spectroscopy of conversion electrons.

This work was funded by the subsidy of the Kazan Federal University for the state assignment in the field of scientific activities and granted by MOST, Taiwan (No.104-2221-E-007-046-MY2, 103-2112-M-007-011-MY3).

### REFERENCES

1. Yang H. Crossover from Kondo-assisted suppression to co-tunneling enhancement of tunneling magnetoresistance via ferromagnetic nanodots in MgO tunnel barriers / H. Yang, S.H. Yang, S. S. Parkin // *Nano Lett.* – 2008. – V. 8. – P. 340–344.
2. Useinov A. Anomalous tunnel magnetoresistance and spin transfer torque in magnetic tunnel junctions with embedded nanoparticles / A. Useinov, L. Ye, N. Useinov, T.H. Wu, C.H. Lai // *Sci. Rep.* – 2015. – V. 5. – P. 18026 (9).

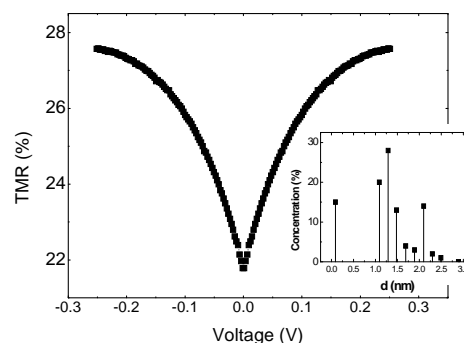


Fig. 1. TMR *via* applied voltage



## **КЭМС поверхностного слоя аустенитной нержавеющей стали, азотированной в плазме электронного пучка**

**Голобородский Б.Ю., Шабашов В.А., Макаров А.В., Гаврилов Н.В.,  
Козлов К.А., Мамаев А.С.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
goloborodsky@imp.uran.ru

### **CEMS of the surface layer of austenitic stainless steel, nitrated in the plasma electron beam**

**Goloborodsky B.Yu., Shabashov V.A., Makarov A.V., Gavrilo N.V.,  
Kozlov K.A., Mamaev A.S.**

The structure of the nitrated in the plasma of an electron beam the surface layers of steel with the use of additional pre-processing friction is discussed.

Азотирование в плазме электронного пучка аустенитных сталей является одним из способов модифицирования поверхности структуры для улучшения её эксплуатационных характеристик.

Задачей было исследование структуры азотированных поверхностных слоёв хромоникелевой нержавеющей стали, в том числе, с использованием предварительной фрикционной обработки. Использование сухого трения скольжения позволяет получить наноструктурированную поверхность стали глубиной 5–10 мкм.

Азотирование проводили с использованием автономного источника плазмы электронного пучка [1]. Мёссбауэровские измерения проводили при комнатной температуре на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в геометрии обратного рассеяния и регистрации электронов конверсии.

В зоне выхода электронов внутренней конверсии (~ 100 нм) в результате ионно-плазменного азотирования стали формируется преимущественно  $\alpha$ (ОЦК) фаза Fe-Cr. В структуре сохраняется (~ 5–10 %) азотистого аустенита. Проведено сопоставление с результатами азотирования стали с предварительной обработкой трением скольжения, а также данными азотирования структуры в токе тлеющего разряда.

Работа выполнена в рамках темы «Структура» (грант УрО РАН (№ 15-9-12-45)) и финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-08-07947).

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. *Гаврилов Н.В.* Влияние параметров электронного пучка и ионного потока на скорость плазменного азотирования аустенитной нержавеющей стали / Н.В. Гаврилов, А.И. Меньшаков // ЖТФ. – 2012. – Т. 82. – №3 – С. 88-93.

*Topic III*

*Advanced materials and modern technologies*

## High-pressure magnetic and structural transitions in the iron containing langasite multiferroics observed by synchrotron Mössbauer and XRD methods

Lyubutin I.S.<sup>1</sup>, Starchikov S.S.<sup>1</sup>, Gavriiliuk A.G.<sup>1,2</sup>, Troyan I.A.<sup>1</sup>, Nikiforova Yu.A.<sup>1</sup>, Naumov P.G.<sup>1</sup>, Struzhkin V.V.<sup>3</sup>, Chumakov A.I.<sup>4,5</sup> and Rüffer R.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow (Russia)

<sup>2</sup>Institute for Nuclear Research, RAS, Troitsk (Russia)

<sup>3</sup>Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Washington DC (USA)

<sup>4</sup>European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France)

<sup>5</sup>National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow (Russia)

lyubutinig@mail.ru

Langasite  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  crystals are of considerable scientific and applied interest owing to their outstanding piezoelectric, acoustic, optical, and laser characteristics. The langasite type compounds containing magnetic cations currently receive widespread attention. The studies of the physical mechanisms underlying an interplay of electrical and magnetic order parameters in such systems can stimulate the development of novel multiferroic materials. In our study, a series of compounds

$A_3M\text{Fe}_3X_2\text{O}_{14}$  ( $A = \text{Ba}, \text{Sr}$ ;  $M = \text{Sb}, \text{Nb}, \text{Ta}$ ;  $X = \text{Si}, \text{Ge}$ ) with the langasite type structure were synthesized with magnetic iron ions at the tetrahedral  $3f$  sites. The low-temperature magnetic and structural properties of these compounds at ambient pressure have been investigated by the transmission Mössbauer spectroscopy (TMS). The crystal structure and magnetic transitions induced by high hydrostatic pressures (up to 60 GPa) at different temperatures (4.2 – 300 K) have been investigated in diamond anvil cells by the nuclear forward scattering (NFS) of synchrotron radiation technique (in APS, Argonn, USA) and by synchrotron Mössbauer spectroscopy (SMS) in ESRF (Grenoble, France). In addition, the high-pressure properties of these compounds were investigated by synchrotron X-ray diffraction and Raman spectroscopy. Several transitions have been discovered at different  $P$ - $T$  conditions. In particular, high magnification in the Neel temperature  $T_N$  from 27 to about 120 K was discovered in the antiferromagnetic phase of  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  at pressure of about 20 GPa (Fig.1). The pressure-induced magnetic and structural transitions are very sensitive to the atomic composition of the langasites. Tentative magnetic  $P$ - $T$  phase diagrams of these compounds are proposed.

This work is supported by the Russian Scientific Foundation (grant № 16-12-10464) and Russian Foundation for Basic Research (grant 14-02-00483a).

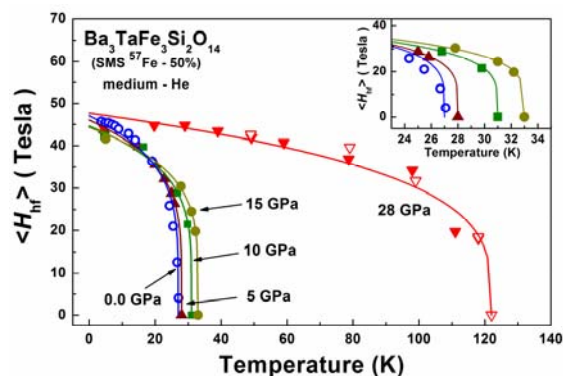


Fig. 1. Temperature dependences of  $H_{\text{hf}}$  at different pressures. The  $T_N$  value dramatically jumps up to 120 K as the result of the structural transition at 20 GPa

## **Мёссбауэровское исследование атомного перераспределения в специально легированных Fe-Ni сплавах при интенсивных деформационных и радиационных воздействиях**

**Шабашов В.А.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
shabashov@imp.uran.ru

### **Mössbauer study of atomic redistribution in Fe-Ni alloys during intense deformation and radiation effects**

Shabashov V.A.

The regularities of deformation and radiation-induced structural transitions in aging Fe-Ni alloys on the way of dissolution of particles of intermetallic compounds in the matrix of the alloys with aging related dynamic and streamlined are investigated.

Особенностью процессов диссипации большой механической энергии и интенсивных радиационных воздействий является активный атомный массоперенос при относительно низких температурах. В теоретических моделях воздействия высокоэнергитических частиц на вещество могут привлекаться модели структурообразования при больших (мегапластических) деформациях. Это объясняется, во-первых, общим фактором насыщения структуры точечными дефектами, и, во-вторых, общими закономерностями диссипации материалом высоких энергий по пути динамических структурно-фазовых переходов. Такого рода структурно-фазовые переходы характеризуются стадийностью, разнонаправленностью и, в ряде случаев, циклическостью.

В настоящем исследовании установлены закономерности деформационно- и радиационно-индуцированных структурных переходов в стареющих Fe-Ni сплавах по пути разрушения областей ближнего атомного порядка и растворения частиц интерметаллидов в матрицах сплавов при сопутствующих динамическом старении и упорядочении.

В экспериментах по облучению нейтронами выявлены процессы радиационно-индуцированного растворения и ускоренного старения интерметаллидов, меняющие направление в зависимости от температуры облучения. В экспериментах по мегапластической деформации установлено, что изменение температуры деформации от 80 до 573 К изменяет направление фазовых переходов от разрушения и растворения интерметаллидов к их дополнительному выделению. Установлено, что химическая активность и подвижность элементов, участвующих в процессах, определяет смену канала релаксации энергии от динамического старения к сдвиговому полиморфному  $\gamma \rightarrow \alpha$  переходу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00908).

## Accelerated mechanosynthesis of high-nitrogen stainless steel: Mössbauer and X-ray diffraction studies

Dorofeev G.A., Lubnin A.N., Ul'yanov A.L., Mukhgalin V.V.

*Physical-Technical Institute, Ural Branch, Russian Academy of Science, Izhevsk (Russia)*  
gadorofeev@mail.ru

Mechanical alloying (MA) in high-energy ball mills is the important processing method for synthesis of various novel materials with a controlled microstructure. The possibility of obtaining highly expanded nanocrystalline solid solutions and observation of unusual low-temperature phase transformations are attractive features of MA. In recent years, there has been an interest in powder metallurgy of advanced high-nitrogen nanocrystalline austenite stainless steels using MA powders as precursors. The great number of studies on MA of nanocrystalline Fe-Cr-N based alloy powders due to a mechanochemical solid-gas (nitrogen) reaction was published. The austenite structure of the alloy was produced beyond 100 h of MA in these works. Here we show that a fully austenitic structure of the powder high-nitrogen alloy 74Fe25Cr10Mn1N can be obtained in record time of 8 hours when the manganese nitride is used as the nitrogen source in MA process.

In the present contribution, the investigation of the defect structure evolution and body-centered cubic (*bcc*) to face-centered cubic (*fcc*) transition during MA of high-nitrogen nanocrystalline nickel-free Fe-Cr-Mn-N alloy by Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction (XRD) is represented. The main component of the  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectra after 1 h of MA is the sextet with a wide hyperfine field distribution in range of 20–35 T. However, since 0.5 h the paramagnetic peak near 0 mm/s appears in the Mössbauer spectra. The relative peak area increases with the duration of MA reaching 100% by 8 h. It is evident that sextet and singlet should be attributed to the ferromagnetic *bcc* (ferrite) and paramagnetic *fcc* (austenite) respectively. The Mössbauer spectrum of a nitrogen-containing austenite was represented by the superposition of several contributions with different isomer shifts: one singlet (from the Fe atoms with no nitrogen interstitial atoms as the nearest neighbors) and one doublet (one nearest nitrogen atom, isomer shift + 0.07 mm/s with respect to singlet, and the quadrupole splitting 0.39 mm/s). Additionally in the XRD spectra of ferrite and austenite, anisotropic effects (*hkl*-dependent broadening and displacements of the reflexes) caused by the presence of stacking faults were found. The grain size, microstrains and stacking fault probabilities were determined from the analysis of the line profiles and anisotropic effects. Thus the deformation dissolution of manganese nitride, the formation of nanocrystalline (grain size about 15 nm) supersaturated with nitrogen iron-base *bcc* phase containing a lot of stacking faults as well as *bcc* to *fcc* phase transformation occur under MA. Faulting increased as the saturation of the *bcc* phase with nitrogen rose. It is concluded that the atomic mechanism of the *bcc* to *fcc* transformation has deformation nature. Our results showed that an important role in the *bcc* to *fcc* transformation during MA of high-nitrogen Fe-based alloys is played by the deformation stacking faults.

The work was supported by RFBR (grant № 16-32-00487).

## Деформационно-ускоренное атомное перераспределение в ОЦК Fe-Mn сплавах

**Козлов К.А., Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Пилюгин В.П., Ляшков К.А.,  
Заматовский А.Е.**

*ФГБУН Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)  
kozlov@imp.uran.ru*

### Deformation-accelerated atomic redistribution in BCC Fe-Mn alloys

Kozlov K.A., Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Piliugin V.P., Lyashkov K.A., Zamatovsky A.E.

It is established that deformation of the binary Fe- $x$ Mn ( $x$ , mass.% 4, 8, 9, 10) alloys during milling in a ball mill and shear under pressure in Bridgman anvils leads to the near bundle of atoms of Fe and Mn.

Методом мёссбаэровской спектроскопии установлено, что деформация бинарных Fe- $x$ Mn ( $x$ , масс.% 4, 8, 9, 10) сплавов при помоле в шаровой мельнице и при сдвиге под давлением в наковальнях Бриджмена приводит к ближнему расслоению атомов Fe и Mn, возрастающему при увеличении температуры деформации от 77 до 573 К. Деформационное воздействие способствует насыщению структуры точечными дефектами, а увеличение температуры деформации приводит к интенсификации диффузионных процессов и ускорению атомного расслоения вследствие несмешиваемости Fe и Mn в ОЦК твердом растворе (см. рис.1).

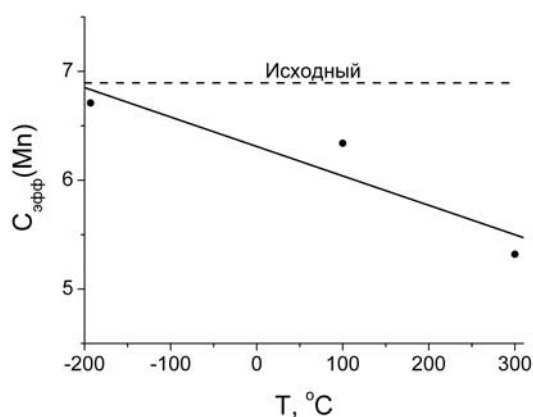


Рис. 1. Зависимость эффективной концентрации Mn в сплаве Fe-7Mn от температуры сдвига под давлением

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00908).

## Исследование механосинтезированного $\chi$ -карбида Хэгга

Баринов В.А.<sup>1</sup>, Протасов А.В.<sup>1</sup>, Суриков В.Т.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н.Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург (Россия)

protasov@imp.uran.ru

### Studying mechanosynthesized Hägg carbide ( $\chi$ -Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>)

Barinov V.A., Protasov A.V., Surikov T.S.

Methods of thermomagnetic analysis and Mössbauer spectrometry (<sup>57</sup>Fe) were used to investigate the formation of Hägg carbide ( $\chi$ -Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>) under the conditions of mechanical milling of  $\alpha$ -Fe in a medium of liquid hydrocarbons. It has been established that, with the employed parameters of milling, the synthesis of  $\chi$  carbide begins after the completion of the stage of the formation of cementite ( $\theta$  phase). The optimum temperature of heating of the synthesized Hägg carbide is 775 K; the Curie temperature is  $T_C = 520$  K. Under the effect of anisotropy field, the crystallographically equivalent atoms Fe(4e) become nonequivalent (Fe( $e_1$ ) and Fe( $e_2$ )) in the magnetic sense. As a result in the distribution of hyperfine fields  $P(H)$  there were observed additional Mössbauer components  $p(e_1)$  and  $p(e_2)$  with equal fractions of iron atoms in each of the components  $f_{Fe}(e_1) = f_{Fe}(e_2) = 0.1$ , the strength of the fields  $H \approx 11$  and 16 T, respectively.

Методами термомагнитного анализа и мёссбауэровской спектроскопии проведено исследование процесса формирования карбида Хэгга ( $\chi$ -Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>) при механическом измельчении  $\alpha$ -Fe в среде жидких углеводородов. Установлено, что при использованных параметрах измельчения синтез  $\chi$ -карбида начинается по завершению стадии образования цементита ( $\theta$ -фаза). Определена граница температурной устойчивости монофазного состояния  $\chi$ -карбида, не превышающая 800 К. При  $T > 800$  К  $\chi$ -карбид распадается на цементит и свободный углерод. Оптимальная температура нагрева синтезированного карбида Хэгга составляет 775 К при величине температуры Кюри  $T_C = 520$  К. Анализ мёссбауэровских данных и результатов геометрического моделирования конфигураций атомов Fe в элементарной ячейке  $\chi$ -карбида позволил установить, что идеальное соотношение заселенности позиций (0.2 : 0.4 : 0.4) выполняется при учете анизотропной составляющей  $h_{an}$  поля сверхтонкого взаимодействия. Под влиянием поля анизотропии кристаллографически эквивалентные атомы Fe(4e) становятся неэквивалентными в магнитном отношении. Данная особенность проявляется наличием дополнительных компонент при анализе распределения сверхтонких полей  $P(H)$ :  $p(e_1)$  и  $p(e_2)$  с равными долями атомов железа в каждом из вкладов  $f_{Fe}(e_1) = f_{Fe}(e_2) = 0.1$  и значениями полей  $H \approx 11$  и 16 Тл соответственно.

Работа выполнена при поддержке УрО РАН (проект №15-9-2-19).

## Мёссбауэровские исследования механического сплавления высококонцентрированных сплавов Fe-Cr

**Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Порсев В.Е., Колодкин Д.А., Загайнов А.В., Немцова О.М.**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск (Россия)*

porsev@ftiudm.ru

### Mössbauer study of mechanical alloying of highly concentrated Fe-Cr alloys

**Yelsukov E.P., Ul'yanov A.L., Porsev V.E., Kolodkin D.A., Zagainov A.V., Nemtsova O.M.**

The kinetics of mechanical alloying of Fe and Cr mixtures (Cr content was varied from 20 to 48 at. %) has been studied by means of Mössbauer spectroscopy, X-ray diffraction and temperature measurements of the dynamic magnetic susceptibility. The differences in mechanical alloying process for samples with Cr content higher than 30 % and below that value have been detected for the first time.

Методами мёссбауэровской спектроскопии, рентгеновской дифракции и температурными измерениями динамической магнитной восприимчивости изучена кинетика механического сплавления (МС) смесей порошков Fe и Cr с содержанием Cr в исходных смесях от 20 до 48 ат. %.

Впервые обнаружены различия в процессе механического сплавления для образцов с содержанием Cr в исходной смеси  $\leq 30$  % и  $> 30$  %. В первом случае наблюдается односторонний процесс растворения атомов Cr в Fe на всем протяжении процесса механической обработки смеси в шаровой планетарной мельнице. Второй случай на начальном этапе также характеризуется растворением атомов Cr в Fe, однако, начиная с определенного значения времени измельчения  $t_{\text{mil}} = 2$  ч происходит обратный процесс растворения атомов Fe в Cr. Образцы после МС характеризуются концентрационно неоднородным распределением атомов Cr и Fe в частицах, особенно при концентрации Cr в исходной смеси  $> 30$  %.

При МС смесей Fe и Cr необходимо учитывать появление значительного износа материала измельчающих тел и способность продуктов износа участвовать в МС с исходной смесью.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 16-03-00655.



## Локальные состояния атомов железа и сверхтонкие взаимодействия ядер $^{57}\text{Fe}$ в $\text{Li}_x\text{Fe}_{1-y}\text{M}_y\text{PO}_4$ ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ )

**Ярославцев С.А.<sup>1</sup>, Востров Н.И.<sup>1</sup>, Скундин А.М.<sup>2</sup>, Кулова Т.Л.<sup>2</sup>,  
Ярославцев А.Б.<sup>1,3</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт физической химии и электрохимии им. Фрумкина, Москва (Россия)

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Курнакова, Москва (Россия)

YaroslavtsevSA@gmail.com

### Local states of iron atoms and hyperfine interactions of $^{57}\text{Fe}$ nuclei in $\text{Li}_x\text{Fe}_{1-y}\text{M}_y\text{PO}_4$ ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ )

Yaroslavtsev S.A., Vostrov N.I., Skundin A.M., Kulova T.L.,  
Yaroslavtsev A.B., Rusakov V.S.

Lithium iron phosphates doped with different metals and exposed to the charging process  $\text{LiFe}_{1-y}\text{M}_y\text{PO}_4$  ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ ) have been studied by  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectroscopy. It has been established that the presence of impurity atoms leads to significant changes of hyperfine parameters for  $\text{Fe}^{3+}$  cations. Noticeable changes in the hyperfine parameters for  $\text{Fe}^{2+}$  have not been observed. It is shown that the distribution of transition metal atoms is not statistical – no more than one in the nearest cationic environment of Fe atom.

Литиевый фосфат железа  $\text{LiFePO}_4$  с частичным замещением катионов  $\text{Fe}^{2+}$  на катионы, окисляющиеся до трехвалентного состояния при более высоком напряжении, чем  $\text{Fe}^{2+}$ , является одним из наиболее перспективных материалов для использования в литий-ионных аккумуляторах. Работа посвящена мёссбауэровским исследованиям влияния легирования на процессы, протекающие при электрохимической зарядке в материалах состава  $\text{LiFe}_{1-y}\text{M}_y\text{PO}_4$  ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ ;  $0 \leq y \leq 0.3$ ). Спектры обрабатывались методом модельной расшифровки набором квадрупольных дублетов и методом восстановления распределения сверхтонких параметров гамильтониана комбинированного магнитного дипольного и электрического квадрупольного взаимодействий. Установлено, что при электрохимической зарядке для всех исследованных составов наблюдается восстановление катионов железа –  $\text{Li}_x^+\text{Fe}_{x-y}^{2+}\text{Fe}_{1-x}^{3+}\text{M}_y^{2+}\text{PO}_4$ . В случае легирования атомами Mn дальнейшее повышение напряжения приводит к восстановлению катионов марганца. Внедрение примесных атомов заметным образом влияет на сверхтонкие параметры парциальных спектров катионов  $\text{Fe}^{3+}$  при различных степенях зарядки. Показано, что примесные атомы переходных металлов распределены по позициям атомов железа не случайным образом – не более одного в ближайшем катионном окружении атома Fe.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-32-00707мол\_а).

## Optimizing Fe<sup>2+</sup> molecular switches by Mössbauer spectroscopy

Éva G. Bajnóczy<sup>1</sup>, Csilla Bogdán<sup>1</sup>, László Deák<sup>1</sup>, Dénes Lajos Nagy<sup>1</sup>, Zoltán Németh<sup>1</sup>,  
Mátyás Pápai<sup>1,2</sup>, György Vankó<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest (Hungary)

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Technical University of Denmark, Kongens Lyngby (Denmark)

nagy.denes@wigner.mta.hu

Switchable molecular compounds are potential candidates in the design of new, quick switching devices and high-density data storage systems. One of the most important family of these materials is formed by transition metal, especially Fe<sup>2+</sup> centered organometallic complexes of medium ligand-field strength, the so called spin-crossover systems which – under certain circumstances – can undergo switching between low- and high-spin states. Regarding their room-temperature functionality, they became even more hopeful since the discovery of the LIESST phenomenon which allows for switching the molecules back and forth using light pulses of different wavelengths.

One of the most promising candidate for practical usage is the tridentate polypyridine ligand containing [Fe(tpy)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> (tpy: 2,2':6',2''-terpyridine) complex which, in spite of its strong ligand field, has – at low temperatures and in certain matrices – a 10 orders of magnitude longer lived light-induced HS state than other similar strong-field complexes like [Fe(bipy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup> (bipy: 2',2''-bipyridine). In this complex the iron(II) center is surrounded by two pairs of 3 N donor atoms in D<sub>2d</sub> symmetry as, due to geometrical constrains, the 6 N atoms cannot form an ideal octahedron around it. However, as proposed by McCusker and coworkers<sup>1</sup>, releasing this geometric constrain may lead to a more relaxed and close-to-ideal local structure with enhanced ligand-field strength, a key requirement to get longer-lived excited states thus a real potential for room-temperature applications.

The terpy ligand can be modified based on both chemical intuition and quantum chemical calculations to design more efficient molecular switches. The iron(II) complex of 2,6-di(quinolin-8-yl)pyridine (dqp) where an extra (condensed) side ring shifts the donor atoms further out thereby allowing for a less strained coordination is a probable candidate. The new molecules can be tested by various methods including Mössbauer spectroscopy. We present detailed comparison of the local symmetry, electronic structure and vibrational behavior of the tpy and dqp complexes of iron(II) with different (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> and PF<sub>6</sub><sup>-</sup>) counter ions based on the analysis of hyperfine interactions, second-order Doppler shift and the temperature dependence of the Lamb–Mössbauer factor as taken from <sup>57</sup>Fe transmission Mössbauer spectra in the 77 K ≤ T ≤ 300 K temperature range. These results give us a more solid basis for ligand design and further development of molecular switches.

### REFERENCE

1. *Jamula L.L.* Synthesis and Characterization of a High-Symmetry Ferrous Polypyridyl Complex: Approaching the <sup>5</sup>T<sub>2</sub>/<sup>3</sup>T<sub>1</sub> Crossing Point for FeII / L.L. Jamula, A.M. Brown, D. Guo, J.K. McCusker // *Inorg. Chem.* – 2013. – V 53, – № 1. – P. 15–17.

## Изучение промотированных медью и калием Fe-нанесенных катализаторов методом мёссбауэровской спектроскопии

**Перфильев Ю.Д., Чернавский П.А., Панкина Г.В.**

*Химфак МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

perf@radio.chem.msu.ru

### Study of promoted by Cu and K iron-based catalysts by means of Mössbauer spectroscopy

Perfiliev Yu.D., Chernavskii P.A., Pankina G.V.

Promotional influence of K and Cu on chemical state of iron in catalysts for Fischer-Tropsch synthesis is studied by using Mössbauer spectroscopy.

Синтез Фишера-Тропша является эффективным методом превращения синтез-газа ( $H_2+CO$ ) в жидкое топливо с использованием железо-содержащих катализаторов, для которых калий и медь наиболее часто используемые химические промоторы. Их влияние на состояние железа, нанесенного на силикагель, изучено методом мёссбауэровской спектроскопии. Параметры спектров приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры спектров

Катализатор	Формы железа	$\delta$ , мм/с	$\Delta$ , мм/с	$\Gamma$ , мм/с	$H$ , кЭ	$A$ , %	$\chi^2$
15% Fe	Fe 1	0.34(4)	0.90(14)	0.73(18)	501.1(3)	6	1.5
	Fe 2	0.29(10)	0.48(18)	0.62		4	
	Fe 3	0.59(4)		0.37(8)		2	
	Fe 4	0.365(3)	-0.21(1)	0.27(2)		88	
15% Fe, 1% K	Fe 1	0.30(1)	0.93(7)	0.54(8)	502.0(4)	13	1.0
	Fe 2	0.35(1)	0.46(4)	0.39(5)		9	
	Fe 4	0.374(5)	-0.20(1)	0.25(3)		78	
15% Fe, 1% Cu	Fe 1	0.336(7)	0.91(1)	0.58(3)	504.7(5)	19	1.4
	Fe 2	0.367(6)	0.47(2)	0.39(3)		12	
	Fe 4	0.368(5)	-0.17(1)	0.36(4)		69	

Основной компонентой спектров является секстет с магнитным полем на ядрах железа от 493.7 до 504.7 кЭ (форма Fe 4, Табл. 1). В спектрах присутствуют линии парамагнитных форм железа. Разложение спектров допускает предположение о нескольких состояниях железа (формы Fe 1 и Fe 2). По изомерному сдвигу (0.29 – 0.37 мм/с, Табл. 1) их следует отнести к ионам  $Fe^{III}$ , находящимся в октаэдрическом окружении ионов кислорода.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 16-03-00215).

## Формирование легированного Ni цементита в процессе механохимического синтеза и последующих отжига

Ульянов А.Л., Ульянов А.И., Чулкина А.А., Елсуков Е.П.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск (Россия)*  
ulyanov@ftiudm.ru

### Formation of the Ni-doped cementite under mechanochemical synthesis and subsequent annealing

Ul'yanov A.L., Ul'yanov A.I., Chulkina A.A., Yelsukov E.P.

The structure and thermal stability of Ni-doped  $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_{75}\text{C}_{25}$  ( $x = 0; 0.01; 0.03; 0.05; 0.10; 0.15$  и  $0.20$ ) cementite obtained by mechanical alloying and subsequent annealing of Fe, Ni, and C elemental pure components have been studied by means of Mössbauer spectroscopy, X-ray diffraction and magnetic measurements.

Методами мёссбауэровской спектроскопии, рентгеновской дифракции и магнитных измерений изучены структура, параметры сверхтонких взаимодействий и термическая стабильность легированного Ni цементита, полученного в условиях механического сплавления элементарных чистых компонентов Fe, Ni, C и последующих отжига синтезированных нанокompозитов состава  $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_{75}\text{C}_{25}$ , где  $x = 0; 0.01; 0.03; 0.05; 0.10; 0.15$  и  $0.20$ .

Показано, что в результате механохимического синтеза порошков состава цементита  $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_{75}\text{C}_{25}$  в образцах содержится легированный никелем нанокристаллический с искаженной кристаллической решёткой цементит и аморфная  $\text{Am}(\text{Fe},\text{Ni},\text{C})$  фаза.

После отжига при  $400\text{ }^\circ\text{C}$  в составе композитов с  $x \geq 0.10$  содержится как обеднённый ( $T_C \approx 220\text{ }^\circ\text{C}$ ), так и обогащённый ( $T_C \approx 240\text{ }^\circ\text{C}$ ) никелем цементит. Обогащённый никелем цементит образуется в результате кристаллизации аморфной фазы. После отжига при  $500\text{ }^\circ\text{C}$  в композитах остаётся цементит с точкой Кюри  $220\text{ }^\circ\text{C}$ .

Легирование композитов никелем понижает температуру распада содержащегося в них цементита. Цементит полностью распадается в композитах с  $x = 0.05; 0.10; 0.15; 0.20$  после часового отжига при температурах отжига  $650; 600; 575; 550\text{ }^\circ\text{C}$ , соответственно.

Работа выполнена при поддержке УРО РАН (проект № 15-6-2-16).

## Плазмодинамический синтез ультрадисперсных магнитомягких материалов в системе «железо-кислород»

**Шаненков И.И.<sup>1</sup>, Сивков А.А.<sup>1</sup>, Ивашутенко А.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск (Россия)  
Swordi@list.ru

### Plasmadynamic synthesis of ultradispersed soft magnetic materials in the system “iron-oxygen”

Shanenkov I.I., Sivkov A.A., Ivashutenko A.S.

The possibility is shown to implement the synthesis of soft magnetic materials of iron oxides, including magnetite  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  and epsilon phase  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , using iron-containing plasma jet, flowing into oxygen atmosphere. These materials exhibit promising radio-frequency properties and can absorb an electromagnetic radiation in giga- and terahertz range.

Магнитомягкие фазы оксида железа магнетит  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  и  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$  хорошо известны, благодаря своим отличным сорбционным свойствам, позволяющим им эффективно препятствовать распространению электромагнитного излучения (ЭМИ) в области низких (единицы гигагерц) и высоких частот (0.1–0.2 терагерц), соответственно. Главной проблемой является то, что магнетит наиболее эффективен, когда представлен в виде полых частиц, а эpsilon фаза может существовать только в диапазоне до 200 нм [1]. Уникальный метод прямого плазмодинамического синтеза позволяет получать различные фазы в системе Fe-O, причем, меняя энергетические параметры процесса синтеза, можно увеличить выход необходимой фазы. Проведенные исследования по получению материалов показали перспективность метода, так как он позволяет синтезировать порошки с частицами, требуемой формы (рис. 1), которые проявляют отличные сорбционные свойства (рис. 2). Аналитические исследования образцов были проведены с использованием мессбауэровской спектроскопии, рентгеновского фазового анализа, электронной микроскопии.

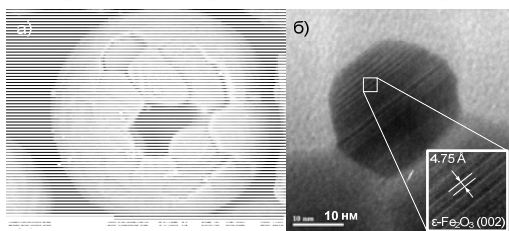


Рис. 1. SEM-изображение частицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (а) и HRTEM частицы  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$  (б)

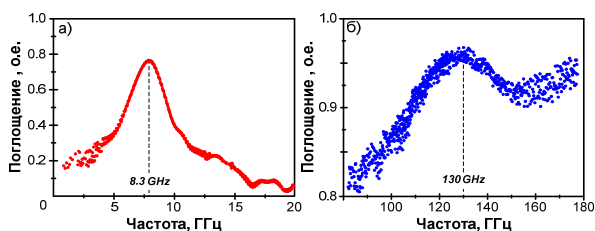


Рис. 2. Кривые поглощения ЭМИ полученных продуктов: а) магнетит; б) эpsilon фаза

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Tronc E. Structural and Magnetic Characterization of  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$  / E. Tronc, C. Chanéac, J.P. Jolivet // Journal of Solid State Chemistry. – 1998. – V. 139. – P. 93–104.

## Исследование условий образования клинкерных минералов в процессе обжига керамики

**Болтакова Н.В., Пятаев А.В.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань (Россия)*

Natalya\_boltakova@rambler.ru

### Study of conditions for the formation of clinker minerals during ceramic firing

Boltakova N.V., Pyataev A.V.

The aim of the study is to provide a simplified tetracalcium alumina ferrite  $4\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $\text{C}_4\text{AF}$ ) technology. Samples were prepared by dry pressing of powders of the respective oxides in a weight ratio close to the stoichiometric composition  $\text{C}_4\text{AF}$ . Mössbauer spectra of samples obtained at room temperature.

Основными фазами, формирующими клинкер, являются двух- и трехкальциевые силикаты, а также четырехкальциевый алюмоферрит  $4\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $\text{C}_4\text{AF}$ ) [1]. Представляет интерес осуществление направленного синтеза минералов при получении высокопрочной керамики. Для этого нами были поставлены модельные эксперименты по получению одного из указанных минералов в лабораторных условиях. В качестве объекта исследований выбран  $\text{C}_4\text{AF}$ , поскольку наличие в его составе катионов железа позволяет наряду с рентгенофазовым анализом применять более чувствительную – мёссбауэровскую спектроскопию. Получение клинкера в промышленных условиях представляет собой сложный многоступенчатый процесс, завершающая стадия которого протекает при температурах около 1400 °С.

Образцы получали методом полусухого прессования из порошков соответствующих оксидов в массовом отношении, близком к стехиометрическому составу  $\text{C}_4\text{AF}$ . Спрессованные в виде шайб диаметром 5 см и высотой 0.5 см образцы обжигались в течение 2 ч при различных значениях температуры 700 – 1300 °С.

Мёссбауэровские спектры образцов, полученные при комнатной температуре показывают образование на промежуточных стадиях обработки системы типа  $\text{Ca}_2\text{FeO}_5$  [2] с неравновесным заселением окта- и тетра- позиций в структуре.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Салахов А.М.* Инновационные материалы: современная керамика / А.М. Салахов, Р.А. Салахова. – Казань: Парадигма. – 2012. – 360 с.
2. *Hirabayashi D.* Formation of brownmillerite type calcium ferrite ( $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ ) and catalytic properties in propylene combustion / D. Hirabayashi, T. Yoshikawa, K. Mochizuki, K. Suzuki, Y. Sakai // *Catal. Lett.* – 2006. – V. 110. – №. 3–4. – P. 269–274.

## Мёссбауэровские исследования легированных атомами магния литиевых фосфатов железа при деинтеркаляции лития

Ярославцев С.А.<sup>1</sup>, Востров Н.И.<sup>1</sup>, Скундин А.М.<sup>2</sup>, Кулова Т.Л.<sup>2</sup>,  
Ярославцев А.Б.<sup>1,3</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт физической химии и электрохимии им. Фрумкина, Москва (Россия)

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Курнакова, Москва (Россия)

Nik.vostrov@gmail.com

## Mössbauer studies of lithium iron phosphates doped with magnesium under lithium deintercalation

Yaroslavtsev S.A., Vostrov N.I., Skundin A.M., Kulova T.L.,  
Yaroslavtsev A.B., Rusakov V.S.

Using doped lithium iron phosphate as a cathode material in Li-ion batteries can potentially lead to enhancement of their properties. Lithium iron phosphate doped with magnesium atoms  $\text{Li}_x\text{Fe}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{PO}_4$  was studied by Mössbauer spectroscopy. Three samples with different degrees of delithiation were investigated in this work. Results show that hyperfine parameters of  $\text{Fe}^{3+}$  subspectra change drastically during the process of delithiation.

В работе проведены исследования литиевого фосфата железа, легированного атомами магния  $\text{Li}_x\text{Fe}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{PO}_4$ , подверженного различным степеням электрохимической зарядки ( $\text{Li}_x\text{Fe}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{PO}_4$ ;  $x \approx 1, 0.5, 0.2$ ). Известно, что замещение катионов железа в  $\text{LiFePO}_4$  катионами, имеющих стабильное более низкое оксидное состояние, чем  $\text{Fe}^{3+}$ , может улучшить характеристики аккумулятора. Исследования проводились методами мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  при различных температурах (300, 82 и 5 К). Основная цель работы – определить характер влияния легирования атомами магния на процесс делитирования в сравнении с нелегированным литиевым фосфатом железа. При анализе спектров, было установлено, что в процессе зарядки уменьшается относительное содержание двухвалентных атомов железа. Установлено, что легирование атомами магния слабо влияет на сверхтонкое взаимодействие двухвалентных атомов железа. В спектрах, полученных при температуре 82 К наблюдается парциальный спектр релаксационного типа, нехарактерный для нелегированного литиевого фосфата железа. Это является следствием присутствия в образце наноразмерных частиц. Соотношение интенсивностей парциальных спектров при разных степенях зарядки образца указывает на то, что в наноразмерных частицах процесс делитирования протекает медленнее, чем в более крупных. Легирование литиевого фосфата железа атомами магния приводит к существенному изменению сверхтонких параметров парциальных спектров, соответствующих трехвалентным атомам железа, при различных степенях делитирования образца.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-32-00707мол\_а).

## Mössbauer study of cation distribution in substituted Mg-ferrite

**Ilyushin A.S.<sup>1</sup>, Kiseleva T.Yu.<sup>1</sup>, Rusakov V.S.<sup>1</sup>, Kabanov V.M.<sup>1</sup>, Sangaa D.<sup>2</sup>, Hirazawa H.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*M.V.Lomonosov Moscow State University, Department of Physics, Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, Ulan Bator (Mongolia)*

<sup>3</sup>*National Technological Institute, Ehime (Japan)*

Kiseleva.Tyu@gmail.com

Specific structural, electrical and magnetic properties of ferrites are determined as by the type of metals, included in their composition, as well the cationic distribution and interaction between them. Besides the classical use of Mg-Cu-ferrite as a soft magnetic material, it is used as a component of ferrocolloids, catalytic systems and gas sensors. An attractive application of ferrites is their use as magnetocaloric components in systems for thermocoagulation therapy.

In our work, polycrystalline ferrite powders of  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  ( $x = 0.2 - 1$ ) system obtained by ceramic technology have been investigated. Synthesized samples showed the non-monotonic dependence of magnetocaloric effect with increasing concentration of copper. To identify the causes of such behavior we performed Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction investigation of the  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  ( $x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ ) samples structural state. The increasing of the lattice parameter and the change in grain sizes of the main cubic phase with the rise of copper concentration was found. This was consistent with a large radius of  $\text{Cu}^{2+}$  compared to  $\text{Mg}^{2+}$ . Model fitting of Mössbauer spectra obtained at different temperatures and in an external magnetic field was carried out by analyzing the hyperfine parameters distributions in accordance with their mutual correlations. The results allowed us to estimate the cation distribution in the samples as a function of the concentration of copper and correlate it with the specific behavior of the magnetocaloric effect.



## Спиновые свойства некоторых комплексов Fe(III)

**Иванова А.Г.<sup>1</sup>, Пятаев А.В.<sup>1</sup>, Домрачева Н.Е.<sup>2</sup>, Груздев М.С.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Казанский федеральный университет, Казань, (Россия)

<sup>2</sup>Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань, (Россия)

<sup>3</sup>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, (Россия)

19ivanova91@gmail.com

### Spin properties of some complexes of Fe(III)

Ivanova A.G., Pyataev A.V., Domracheva N.E., Gruzdev M.S.

The novel dendrimeric iron(III) complexes have been investigated for the first time by Mössbauer spectroscopy in the wide (300–79 K) temperature range. It has been shown that each compound consists of two types of iron centers: low-spin  $S = 1/2$  and high-spin  $S = 5/2$ . A partial thermally driven spin transition was observed in these complexes.

В работе методом мёссбауэровской спектроскопии исследованы два железосодержащих комплекса. Линейный комплекс железа(III) с противоионом  $BF_4^-$  и бисхелатный железо(III)-содержащий комплекс с бис-3,4,5-три(тетрадецилокси)бензоил-4-окси-2-гидроксисалицилиден- $N'$ -этил- $N$ -этилендиамином с внешнесферным анионом  $NO_3^-$  были изучены в диапазоне температур от 300–79 К. Температурная зависимость параметров дублетных компонент, соответствующих высокоспиновым и низкоспиновым (LS) центрам  $Fe^{3+}$ , демонстрирует частичный спин-кроссовер переход в комплексах. Как и в работах [1, 2] в изученных системах форма линии парциальной компоненты, соответствующей LS центрам, демонстрирует значительную асимметрию. Авторами работы [1] этот факт объяснялся спин-спиновой релаксацией с характерными временами, попадающими в мёссбауэровское временное окно. Для комплекса с асимметричным вхождением лиганда основания Шиффа в работе [2] авторами было обнаружено две электронных конфигурации  $(d_{xy})^2(d_{xz}, d_{yz})^3$  и  $(d_{xz}, d_{yz})^4(d_{xy})^1$  для LS центров  $Fe^{3+}$ , как результат внутримолекулярной динамики. Изученные системы в отличие от комплекса, исследованного в работе [2], демонстрируют слабую зависимость формы линии парциального дублета н LS от температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН № 24 «Фундаментальные основы технологий наноструктур и материалов».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Galyametdinov Y. First Example of Coexistence of Thermal Spin Transition and Liquid – Crystal Properties / Y. Galyametdinov, V. Ksenofontov, A. Prosvirin, I. Ovchinnikov, G. Ivanova, P. Gütllich, W. Haase // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2001. – V. 40. – №22. – P. 4269-4271.
2. Domracheva N. Structural, Magnetic and Dinamic Characterization of Liquid Crystalline Iron(III) Schiff Base Complexes with Asymmetric Ligands / N. Domracheva, A. Pyataev, R. Manapov, M. Gruzdev, U. Chervonova, A. Kolker // *Eur. J. Inorg. Chem.* – 2011. – P. 1219–1229.

## The synthesis of metastable quasi-ordered ternary alloys $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35-x}\text{Sn}_x$ ( $x = 5, 10$ at.%) using mechanically-alloyed materials as precursors

Voronina E.V.<sup>1</sup>, Al Saedi Ali Kadim Ikal, Yelsukov E.P., Arzhnikov A.K.<sup>2</sup>, Korolyov A.V.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Physical-Technical Institute, Ural Branch, Russian Academy of Science, Izhevsk (Russia)*

<sup>3</sup>*M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg (Russia)*

alialhulu13@gmail.com

The melting in the liquid phase is not always the universal way of intensification of interactions between metals by converting heterogeneous processes in homogeneous analogous to solutions [1]. There are many examples where the boiling point of low-melting metals below the melting temperature of the second reagent – a refractory metal, so that an interesting alloy or intermetallic compound cannot be obtained by conventional methods of metallurgy. A suitable and promising way to solve this problem is the method of mechanical alloying or mechanochemical synthesis. Further, by means of special heat treatments it is possible to obtain a stable homogeneous partially ordered substitution alloys in a sufficiently wide range of concentrations. In this work we investigated the problem of synthesis of the single-phase ternary quasi-ordered  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35-x}\text{Sn}_x$  ( $x = 5, 10$  at. %) alloys.

X-ray diffraction (XRD) patterns of the samples after mechanical synthesis («as-prepared») contain only the A2 structure reflections. Mössbauer spectra of these alloys show the hyperfine magnetic splitting, typical for the binary disordered nanocrystalline alloys  $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$  with  $x \sim 35$  at. %. Synthesized in a planetary ball mill disordered alloys  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35-x}\text{T}_x$  ( $T = \text{Sn}$ ,  $x = 5, 10$  at. %) were heat treated at  $T = 800, 500$  и  $400$  °C. XRD analysis showed that a heat treatment of the single-phase structurally disordered alloy  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{30}\text{Sn}_5$  in all cases results in the precipitation of the antiferromagnetic phases  $\text{FeSn}$ ,  $\text{FeSn}_2$  with well-defined structural reflections in X-ray diffractograms. Mössbauer spectra of annealed alloys measured at  $T = 300$  K preferably contain a single line, meaning the absence of magnetic hyperfine splitting, which is characteristic for the room-temperature Mössbauer spectra of ordered alloys  $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$  with  $x \geq 35$  at.%. Analysis of the results of X-ray diffraction and Mössbauer measurements suggests that on the heat treatment some quantity of Fe atoms of the "as-prepared" disordered alloy forms the compounds of the Fe-Sn system. This leads to an effective decrease in the Fe atoms concentration in the Fe-Al system and, accordingly, to the increase of Al atoms content in the compound  $\text{Fe}_{65-x}\text{Al}_{35+x}$ .

### REFERENCES

1. *Grigorieva T.F.* Mechanochemical synthesis in metal systems / T.F. Grigorieva, A.P. Barinov, N.Z. Lyakhov, Ed. E.G. Avakumov. – Novosibirsk: Parallel, – 2008. – 311 p.

## **Мёссбауэровский анализ структурно-фазовых превращений в высокоазотистой стали 08X22ГА1.24 при термической обработке и больших пластических деформациях**

**Козлов К.А., Шабашов В.А., Макаров А.В., Заматовский А.Е.,  
Литвинов А.В., Сагарадзе В.В.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
kozlov@imp.uran.ru

### **Mössbauer analysis of the structural-phase transformations in high- nitrogenous steel 08X22ГА1.24 during heat treatment and large plastic deformations**

Kozlov K.A., Shabashov V.A., Makarov A.V., Zamatovsky A.E., Litvinov A.V., Sagaradze V.V.

The thermally activated processes of precipitation and subsequent deformation-induced dissolution of chromium nitrides in high-nitrogenous austenite steel have been investigated.

Методом ЯГР исследованы структурно-фазовые переходы в высокоазотистой стали 08X22ГА1.24 при изотермических отжигах и последующей интенсивной холодной деформации во вращающихся наковальнях Бриджмена при комнатной и криогенной температурах. Сталь получена методом литья с противодавлением азота.

Старение при 450 °С и 550 °С, 30 мин и интенсивная холодная деформация приводят к циклическому выделению (при отжиге) и растворению (при сдвиге под давлением) нитридов хрома в матрице аустенита.

Результатом отжига при 650 °С, 2.5 ч становится полный полиморфный  $\gamma \rightarrow \alpha$  переход с выделением в ОЦК матрице состава 19.6 ат. % Cr, нитридов CrN. В эксперименте по сдвигу по давлением при температурах 573, 292 и 77 К происходит рост содержания хрома в ОЦК матрице на несколько процентов. Более полное растворение нитридов хрома в случае деформации при криогенных температурах связано с ослаблением динамического старения, конкурирующего с неравновесными процессами растворения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00908).

## Мёссбауэровское исследование влияния механоактивации на магнитные свойства $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$

**Кубрин С.П.<sup>1</sup>, Раевский И.П.<sup>1</sup>, Сташенко В.В.<sup>1</sup>, Гусев А. А.<sup>2</sup>, Исупов В.П.<sup>2</sup>, Н. Chen<sup>3</sup>, Chou С.-С.<sup>4</sup>, Сарычев Д.А.<sup>1</sup>, Титов В.В.<sup>1</sup>, Раевская С.И.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Научно-исследовательский институт физики и физический факультет, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону (Россия)

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск (Россия).

<sup>3</sup>University of Macau, Macau (China)

<sup>4</sup>National Taiwan University of Science and Technology, Taipei (Taiwan, China)

stasskp@gmail.com

## Mössbauer study of the effect of mechanical activation on the magnetic properties of $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$

**Kubrin S.P., Raevski I.P., Stashenko V.V., Gusev A.A., Isupov V.P., Chen H., Chou C.-C., Sarychev D.A., Titov V.V. and Raevskaya S.I.**

Mössbauer studies of  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  samples prepared by mechanical activation of  $\text{PbO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  and  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  mixture and subsequent annealing at various temperatures ( $T_a$ ) were performed. The room temperature Mössbauer spectra and the temperatures of magnetic phase transitions ( $T_N$ ) were measured for each sample.

Методами мёссбауэровской спектроскопии проведено исследование образцов  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  приготовленных механоактивацией смеси оксидов  $\text{PbO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  с последующим отжигом при различных температурах ( $T_a$ ). Для каждого образца установлена температура магнитного фазового перехода ( $T_N$ ) (Рис. 1).

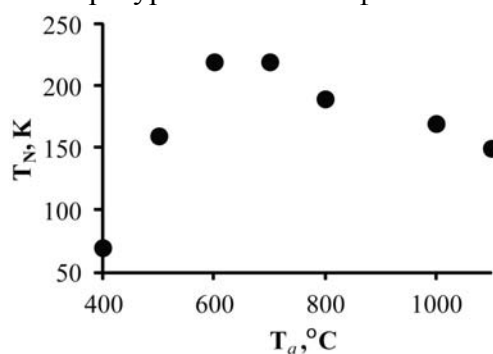


Рис. 1. Зависимость температуры магнитного фазового перехода от температуры отжига

Низкое значение  $T_N$ , при самых малых температурах отжига, по-видимому, связано с малым размером частиц  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  (15–20 мкм), а также с наличием в исходных порошках примеси  $\text{FeNbO}_4$ , и кислородным дефицитом. При температурах отжига 600–700 °C,  $T_N$  достигает максимума, а затем медленно убывает до значений  $\approx 150$  К, характерных для  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ . Величина  $T_N$  в оксидах зависит от числа цепочек Fe-O-Fe, которое в  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  тем больше, чем ниже степень упорядочения катионов Fe/Nb. Таким образом, при температурах отжига

ниже 700 °C, в механоактивированных порошках  $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  присутствуют кластеры с низкой степенью упорядочения Fe/Nb.

## **Влияние температуры мегапластической деформации на перераспределение углерода и полиморфные фазовые переходы в ГЦК Fe-Ni-C сплавах**

**Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Литвинов А.В., Заматовский А.Е.,  
Ляшков К.А., Катаева Н.В.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
shabashov@imp.uran.ru

### **The effect of temperature megaplastic deformation on the redistribution of carbon and polymorphic phase transitions in FCC Fe-Ni-C alloys**

Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Litvinov A.V., Zamatovsky A.E.,  
Lyashkov K.A., Kataeva N.V.

By means NGR-method for high-carbon Fe-Ni alloys of the Invar range of compositions studied structural phase transitions induced by megaplastic deformation in temperature region from 77 to 473 K.

Методом ЯГР в высокоуглеродистых Fe-Ni сплавах инварного диапазона составов исследованы структурно-фазовые переходы, индуцированные мегапластической деформацией в области температур от 77 до 473 К.

Обнаружено активное динамическое старение сплавов при увеличении температуры деформации сдвигом под давлением в наковальнях Бриджмэна. В предварительно состаренном при 873 К, 1 ч сплаве Fe-35Ni-0.5C после деформации при 473 К происходит активизация выхода углерода из ГЦК матрицы твердого раствора вследствие непрерывности горячей деформации и насыщения структуры точечными дефектами, стимулирующими диффузионные процессы. Деформация в области криогенных температур способствует возврату углерода в положение твердого раствора ГЦК матрицы. Энергия деформации частично релаксирует по каналу мартенситного  $\gamma \rightarrow \alpha$  перехода.

В метастабильном сплаве Fe-31Ni-0.5C деформация в интервале температур 473...573 К активизирует выход углерода из положений внедрения твердого раствора, и вследствие повышения  $T_0$  (температуры равновесия  $\alpha$  и  $\gamma$  фаз) дестабилизирует аустенит по отношению к  $\gamma \rightarrow \alpha$  переходу при деформации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00908).

## Гистерезисные свойства и эффект мёссбауэра в порошках быстрозакаленного нанокпозиционного сплава (Nd,Zr)-(Fe,Co)-В

Савченко А.Г., Медведева Т.М., Коровушкин В.В., Щетинин И.В.,  
Менушенков В.П., Бордюжин И.Г.

НИТУ «МИСиС», Москва (Россия)  
algsav@gmail.com

### Hysteresis properties and Mössbauer effect in rapidly solidified (Nd,Zr)– (Fe, Co)–В nanocomposite alloy

Savchenko A.G., Medvedeva T.M., Korovushkin V.V., Shchetinin I.V.,  
Menushenkov V.P., Bordyuzhin I.G.

Complex studies of phase composition, structure, magnetic properties and analysis of the Mössbauer spectra of the rapidly solidified powders of  $\text{Nd}_{10.4}\text{Zr}_{4.0}\text{Fe}_{75.1}\text{Co}_{4.1}\text{B}_{6.4}$  nanocomposite alloy in the as-solidified state and annealed in the temperature range 380 – 700 °C for 30, 60 and 120 min state have been carried out.

С использованием методов рентгеновской дифракции, мёссбауэровской спектроскопии, электронной микроскопии и магнитных измерений выполнены комплексные исследования фазового состава, структуры и магнитных свойств порошков быстрозакалённого (БЗ) сплава  $\text{Nd}_{10.4}\text{Zr}_{4.0}\text{Fe}_{\text{ост.}}\text{Co}_{4.1}\text{B}_{6.4}$  в исходном состоянии и после отжига в интервале температур от 380 до 700 °C длительностью 30, 60 и 120 минут. Показано, что в состоянии после БЗ в сплаве присутствуют магнитотвёрдая фаза  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  (~ 54 % об.) и аморфная фаза (~ 40 % об.). Наличие значительного количества аморфной фазы обуславливают низкие гистерезисные свойства порошков сплава в исходном состоянии, однако после термообработок разной длительности в интервале температур 520 – 560 °C наблюдается резкое возрастание коэрцитивной силы  $H_{ci}$  (до 740 кА/м) и удельной остаточной намагниченности  $\sigma_r$  – до 65 – 70 А·м<sup>2</sup>/кг. Соответствующая удельная намагниченность насыщения  $\sigma_s$  имеет величину ~ 112 А·м<sup>2</sup>/кг, т.е. отношение  $\sigma_r/\sigma_s > 0.5$ . После отжига при температурах выше 600 °C отмечается резкое падение  $H_{ci}$  (до ~ 50 кА/м и ниже) в результате фазового превращения  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B} \rightarrow \alpha\text{-Fe} + \text{Nd}_2\text{Fe}_{17} + \text{ZrB}_2$  с образованием значительного количества фазы  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{17}$ , сопровождающееся резким уменьшением  $\sigma_r$  и величины отношения  $\sigma_r/\sigma_s$ . По результатам выполненных исследований построены диаграммы фазово-структурного состояния, а так же проанализированы мёссбауэровские спектры на ядрах <sup>57</sup>Fe порошков БЗ сплава.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы», соглашение от 22.07.2014 г. № 14.579.21.0038, уникальный идентификатор соглашения RFMEF157914X0038.

## Change of short-range order in iron-based amorphous alloy under the pulsed ion-beam modification

**Nazipov R.A.<sup>1</sup>, Shustov V.A.<sup>2</sup>, Batalov R.I.<sup>2</sup>, Bayazitov R.M.<sup>2</sup>, Pyataev A.V.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Kazan National Research Technological University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Kazan Physical-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, Kazan (Russia)*

<sup>3</sup>*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

rusnazipov@kstu.ru

Pulsed ion modification (PIM) of the amorphous alloy  $\text{Fe}_{77}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13}\text{B}_6$  as produced spinning technology leads to variation vector magnetization from parallel to normal plane ribbon [1]. This is due to the occurrence of compressive stresses in the ribbon volume. X-ray studies have shown persistence of the amorphous state. Mössbauer studies have shown a decrease 2 and 5 lines of broad ferromagnetic sextet with an increase in the number of pulses (Fig. 2-4). Form curve of hyperfine fields of the distribution  $P(H_{\text{hf}})$  for the samples after PIM is changing: disappears small maximum at about 120 kOe field, but instead there are "oscillations" of curve  $P(H_{\text{hf}})$  (Fig. 2\*-4\*). Likely this is due to a decrease in the intensity of lines 2 and 5 in ferromagnetic sextet, but not structural changes. For ribbon after PIM in that case if Mössbauer spectrum obtained with external magnetic field along the ribbon and transversely to  $\gamma$ -rays, it is seen recovering 2 and 5 lines in ferromagnetic sextet (Fig. 5), and on the curve  $P(H_{\text{hf}})$  reappears small maximum (Fig. 5\*). The emergence of unresolved peaks on the curve  $P(H_{\text{hf}})$  after the PIM can be attributed to "fast reamorphization" ribbon, which leads to appearance a locally ordered regions of the remaining X-ray amorphous, which is also confirmed by the increase in the share of Lorentzian contribution to the X-ray halo in the diffraction pattern.

### REFERENCES

1. Nazipov R.A. Effect of power pulsed ion beam irradiation on  $\text{Fe}_{77}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13}\text{B}_6$  amorphous alloy: Mössbauer and X-ray diffraction studies / R.A. Nazipov, A.V. Pyataev, A.A. Ignatyev et al. // *Physics and Chemistry of Materials Treatment (in Russ.)*. – 2015. – №6. – P. 5-15.

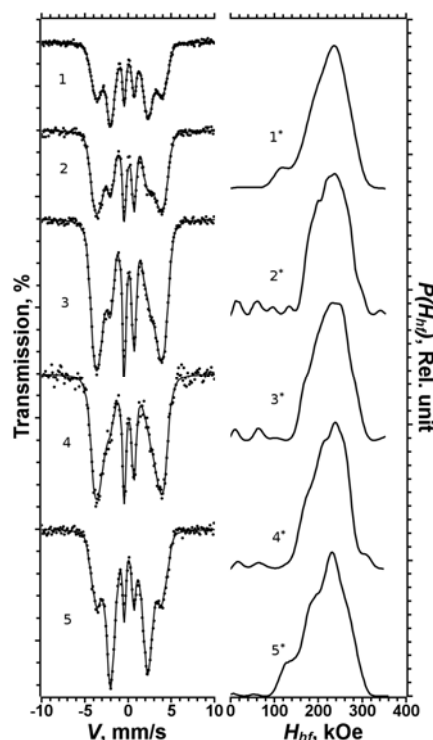


Fig. 1. Mössbauer spectrum (without labels) and curve of hyperfine fields of the distribution (\* - label right-over number): 1 — as is; 2 — 2 pulses (pls.); 3 — 5 pls.; 4 — 10 pls.; 5 — 10 pls. spectrum obtained with external field

## Контроль распределения железа в реакторном бериллии

**Петров В.И., Филиппов В.П.**

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва (Россия)*

vipetrov@mephi.ru

### Iron distribution control in reactor beryllium

Petrov V.I., Filippov V.P.

Mössbauer spectroscopy is used to investigate distribution of iron atoms in reactor beryllium. It is shown the difference in iron state on near surface layers and in volume.

Бериллий используется в ряде ядерных реакторов и является ключевым материалом в термоядерном проекте. Для обеспечения удовлетворительной эксплуатации бериллиевых блоков при высоких повреждающих дозах необходимы знания о структурно-фазовых переходах под воздействием облучения и термообработок. Нами накоплен опыт получения и расшифровки мёссбауэровских спектров технического бериллия после термообработки. Наиболее качественные спектры пропускания получены с резонансным детектором, электроны конверсии регистрировались газопоточным пропорциональным детектором.

Из-за сложности послереакторных измерений проведен ряд имитационных экспериментов. Представлен один из таких экспериментов, в связи с предполагаемым оснащением реакторного бериллия оболочкой из алюминия – выдержка бериллия (с 0.1 %  $^{57}\text{Fe}$ ) в контакте с алюминием при 650 °С и затем длительный отжиг.

На рис. 1 показаны спектры  $^{57}\text{Fe}$  в образцах бериллия, где 1) линии железосодержащей вторичной фазы, предположительно  $\text{FeBe}_{11}$ , 2) линии  $\text{AlFeBe}_4$  3) линии твердого раствора железа в бериллии. Спектр пропускания (а) и конверсионный спектр приповерхностных слоев (b) состоит в основном из линий вторичных фаз и остаточного твердого раствора. Имеются некоторые различия в значениях мёссбауэровских параметров фаз, находящихся в объеме и в приповерхностных слоях. В объеме железо в фазе 1 составляет 80 % от общего содержания, а в приповерхностных слоях – около 68 %. Полученные данные могут быть полезны для объяснения радиационных повреждений реакторного бериллия.

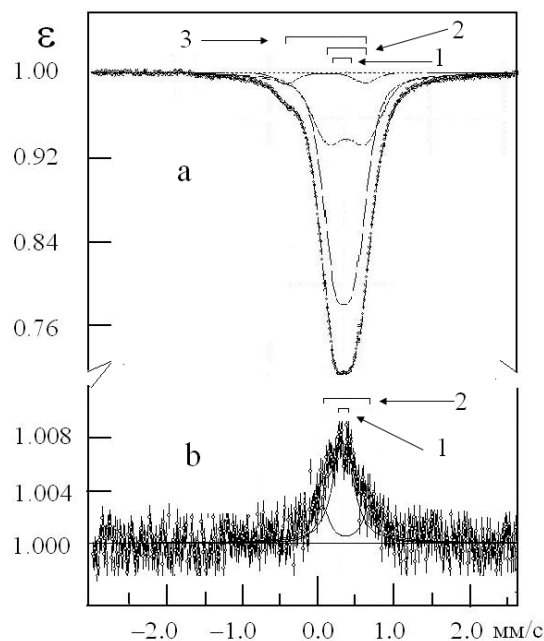


Рис. 1. Спектры  $^{57}\text{Fe}$  в бериллии технической чистоты: а) пропускания; б) на конверсионных электронах до глубины – 0.8 мкм от поверхности



## Гистерезисные свойства и мёссбауэровская спектроскопия нанокompозитов типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ , синтезированных методом механоактивации

Савченко А.Г., Рафальский А.И., Щетинин И.В., Менушенков В.П.

*НИТУ «МИСиС», Москва (Россия)*

909bc1a@gmail.com

### Hysteresis properties and Mössbauer spectroscopy of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$ nanocomposites synthesized by a mechanical alloying technique

Savchenko A.G., Rafalsky A.I., Shchetinin I.V., Menushenkov V.P.

Nanocomposites based on  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha\text{-Fe}$  alloy system attract researchers' attention up till now because of the possibility of obtaining of hard magnetic materials with high remanence magnetization values and therefore with high values of magnetic energy product and reduced rare earth metals content.

Исходным материалом для использования служили порошки промышленно выпускаемого сплава системы Nd-Fe-B марки NQP-D и карбонильного  $\alpha\text{-Fe}$ , при этом состав порошковых композиций описывается формулой  $(1-x)_{\text{NQP-D}} + x_{\alpha\text{-Fe}}$ , где  $x = 0, 0.1, 0.3$  масс. %. Композиции получали методом механоактивации (МА).

Были выполнены комплексные рентгеновские и мёссбауэровские исследования, измерения гистерезисных свойств нанокompозиционных порошков в состояниях после высокоэнергетического помола длительностью 30 и 60 мин, а также после отжигов длительностью 5, 10, 20 мин в интервале температур 500–750 °С. Фазовый состав порошков определяли методом рентгеноструктурного анализа, а также с использованием мёссбауэровской спектроскопии. Измерение магнитных свойств проводили на вибрационном магнитометре в полях до 2 Тл. Установлено, что в процессе МА гистерезисные свойства порошков с  $x = 0$  существенно понижаются, тогда как у нанокompозитов с  $x > 0$  наблюдается небольшое снижение коэрцитивной силы  $H_{ci}$  и заметное повышение удельных остаточной намагниченности  $\sigma_r$  и намагниченности насыщения  $\sigma_s$ . После отжига при температурах выше 650 °С  $H_{ci}$  и  $\sigma_r$  механоактивированного сплава NQP-D повышаются, а у нанокompозитов с  $x > 0$  – наоборот, и  $H_{ci}$ , и  $\sigma_r$  уменьшаются в разы. Полученные результаты обсуждаются с учётом сведений о фазово-структурном состоянии нанокompозиционных порошков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы», соглашение от 27.06.2014 г. № 14.575.21.0043, уникальный идентификатор соглашения RFMEFI57514X0043.

## Степень атомного порядка в $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$ , допированном Li

**Сташенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И.,  
Малицкая М.А.**

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,  
Ростов-на-Дону (Россия)  
z\_machine@mail.ru*

### Atomic order in Li-doped $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$

Stashenko V.V., Raevski I.P., Kubrin S.P., Sarychev D.A., Raevskaya S.I., Malitskaya M.A.

Li-doped  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$  demonstrates the presence of a singlet in Mössbauer spectrum in distinction of pure composition. This evidences on possibility of partial long range ordering of atoms Fe and Nb in sublattice B.

Ранее было показано, что чистый  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$  при 300 К имеет мёссбауэровский спектр, описываемый двумя дублетами, что подтверждается низкотемпературными измерениями, обнаружившими два хорошо разрешимых секстета [1]. Спектр  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$ , допированного литием, содержит помимо двух дублетов – синглет, который обусловлен двумя конфигурациями ближайших соседей в подрешетке В, одна из которых соответствует полному атомному упорядочению в составе. Так как они неразличимы для мёссбауэровской спектроскопии, на основании этих данных нельзя однозначно утверждать факт частичного атомного упорядочения. Однако температура антиферромагнитного фазового перехода уменьшилась от 150 К для чистого  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$  до 120 К для допированного литием [2], что обусловлено уменьшением количества связей Fe-O-Fe ввиду частичного атомного упорядочения.

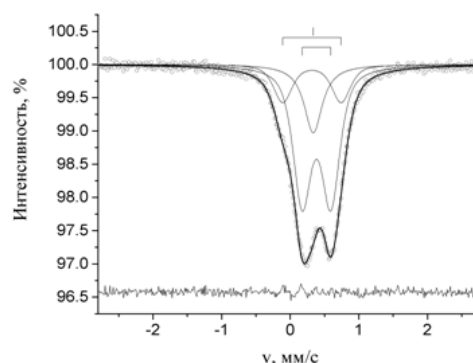


Рис. 1. Расшифровка мёссбауэровского спектра  $\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$ , допированного литием

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Raevski I.P.* Magnetic properties of  $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ : Mössbauer spectroscopy and first-principles calculations / I. P. Raevski, S. P. Kubrin, S. I. Raevskaya, D. A. Sarychev, S. A. Prosandeev, M. A. Malitskaya // *Phys. Rev. B* – 2012. – V. 85. – P. 224412-1 – 224412-5.
2. *Raevski I.P.* Dielectric and Mossbauer studies of perovskite multiferroics / I.P. Raevski, S.P. Kubrin, S.I. Raevskaya, D.A. Sarychev, V.A. Malitskaya, M.A. Seredkina, V.G. Smotrakov, I.N. Zakharchenko, V.V. Eremkin // *Ferroelectrics*. – 2008. – V. 373. – P.121–126.

## Мёссбаэровские исследования перовскитов $A_2\text{FeNbO}_6$ ( $A = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ )

**Стащенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И.,  
Малицкая М.А.**

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,  
Ростов-на-Дону (Россия)  
z\_machine@mail.ru*

### Mössbauer study of perovskites $A_2\text{FeNbO}_6$ ( $A = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ )

Stashenko V.V., Raevski I.P., Kubrin S.P., Sarychev D.A., Raevskaya S.I., Malitskaya M.A.

Complex paramagnetic Mössbauer spectra structure of perovskites  $A_2\text{FeNbO}_6$  ( $A = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ ) was revealed allowing one to estimate order degree in these compositions on the base of proposed model of Fe and Nb atoms distribution around the probe  $^{57}\text{Fe}$ . All of the objects of this investigation have demonstrated total absence of long-range ordering.

Мёссбаэровские спектры перовскитов  $A_2\text{FeNbO}_6$  ( $A = \text{Pb, Ca, Ba, Sr}$ ) в диапазоне температур от 300 до 700 К имеют сложную структуру, состоящую из трех дублетов, соответствующих биномиальному распределению конфигураций, половина из которых представлена на рис. 1, а вторая половина получается инверсией сорта соседнего атома.

В таблице 1 представлено соответствие конфигураций (рис. 1) и дублетов в спектрах. Наибольшую близость к статистическому расчету без учета энергии взаимодействия следует относить к наибольшему разупорядочению атомов Fe и Nb в составе.

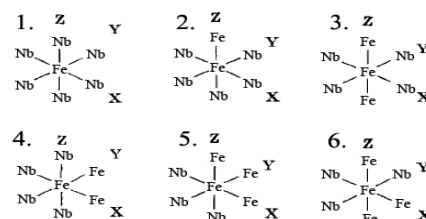


Рис. 1. Конфигурации размещения атомов Fe и Nb в позициях B

Таблица 1. Доли компонент в расчётных и экспериментальных спектрах перовскитов для различных конфигураций размещения атомов Fe и Nb в их кислородных октаэдрах

Конфигурации	Номера конфигураций размещения атомов $B'$ и $B''$ (см. рис. 3)			
	2 и 4	6	3	1 и 5
Доли компонент в спектрах:	трёх дублетов, %			синглета, %
	$1 - Q_{\text{мин}}$	$2 - Q_{\text{ср}}$	$3 - Q_{\text{макс}}$	
расчётном:	56.3	18.8	9.4	15.5
экспериментальном (отношение к расчётной доле) для тройных перовскитов:				
$\text{Pb}_2\text{FeNbO}_6$	$65.4 \pm 1.1$ (1.16)	$31.5 \pm 1.1$ (1,68)	$3.1 \pm 0.3$ (0.33)	0 (0)
$\text{Ca}_2\text{FeNbO}_6$	$53.9 \pm 2.1$ (0.96)	$38.9 \pm 1.5$ (2.07)	$7.2 \pm 0.7$ (0.77)	0 (0)
$\text{Sr}_2\text{FeNbO}_6$	$27.8 \pm 1.5$ (0.49)	$59.7 \pm 1.6$ (3.18)	$12.5 \pm 0.6$ (1.33)	0 (0)
$\text{Ba}_2\text{FeNbO}_6$	$30.1 \pm 0.5$ (0.53)	$55.4 \pm 0.3$ (2.95)	$14.5 \pm 0.8$ (1.54)	0 (0)

## Изменение фазового состава биогенных наночастиц ферригидрита в результате ультразвуковой обработки

**Столяр С.В.<sup>1,2</sup>, Байюков О.А.<sup>1</sup>, Исхаков Р.С.<sup>1</sup>, Ярославцев Р.Н.<sup>2</sup>, Ладыгина В.П.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики СО РАН, Красноярск (Россия)

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, Красноярск (Россия)

<sup>3</sup>Международный научный центр исследований экстремальных состояний организма при Президиуме КНЦ СО РАН, Красноярск (Россия)  
stol@iph.krasn.ru

### The change of phase composition of biogenic ferrihydrite nanoparticles as a result of ultrasonic treatment

Stolyar S.V., Bayukov O.A., Iskhakov R.S., Yaroslavtsev R.N., Ladygina V.P.

Recovery of iron of the ferrihydrite nanoparticles was found as a result of ultrasonic treatment.

В результате ультразвуковой обработки в режиме кавитации, центрифугирования и т. д. [1] биомассы бактерий образуют устойчивый водный золь и осадок. Золь представляет собой наночастицы ферригидрита покрытые органической оболочкой. В работе изучены методом мёссбауэровской спектроскопии высушенные золи и осадки. На рис. 1 приведены полученные спектры, в Таблице 1 даны результаты расшифровки. Позиции  $Fe^{3+}$ , обозначенные как Fe1, Fe2, Fe3, характерны для наночастиц ферригидрита [2]. В осадках обнаружена ОЦК фаза Fe.

Таблица 1. Параметры мёссбауэровских спектров

	IS	H	QS	W	A	Поз.
золь	0.346	-	0.51	0.37	0.58	Fe1
	0.348	-	0.81	0.29	0.27	Fe2
	0.351	-	1.14	0.30	0.15	Fe3
осадок	0.008	323	0.03	0.23	0.07	$\alpha$ -Fe
	0.344	-	0.53	0.36	0.58	Fe1
	0.349	-	0.85	0.28	0.24	Fe2
	0.343	-	1.18	0.29	0.11	Fe3

Работа поддержана Специальной программой Министерства Образования и Науки Российской Федерации для Сибирского Федерального Университета.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Патент № 2457074. Способ получения наночастиц ферригидрита. В. П. Ладыгина, К. В. Пуртов, С. В. Столяр, Р. С. Исхаков и др. – СФУ. – 2012.

2. Stolyar S.V. Mössbauer study of bacterial ferrihydrite / S.V. Stolyar et al. // Inorg. Mater. – 2007. – V. 43. – P. 638.

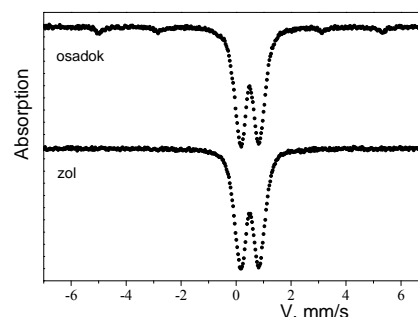


Рис. 1. Мёссбауэровские спектры высушенного золя и осадка

# **Релаксационные структурно-фазовые превращения в Fe-Ni-Al(Ti) сплавах при мегапластической деформации. Влияние температуры и скорости деформации**

**Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Козлов К.А., Литвинов А.В., Катаева Н.В.**

*ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург (Россия)*  
shabashov@imp.uran.ru

## **Relaxation of structural-phase transformations in Fe-Ni-Al(Ti) alloys under megaplastic deformation.**

### **The effect of temperature and rate of deformation**

Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Kozlov K.A., Litvinov A.V., Kataeva N.V.

The kinetics of deformation "dissolution-allocation" of intermetallics in the metal matrix is governed by the dynamic ageing, increasing with increasing temperature and decreasing rate of deformation.

Методом мёссбауэровской спектроскопии исследовано влияние температуры и скорости мегапластической деформации на фазовые переходы «растворение-выделение» интерметаллидов в стареющих аустенитных сплавах Fe-36Ni-9Al и Fe-36Ni-3Ti.

Установлено, что при деформации во вращающихся наковальнях Бриджмэна в интервале температур от криогенных (жидкий азот) до 573 К происходит смена направления фазовых переходов от атомного разупорядочения и растворения интерметаллидов к их дополнительному ускоренному выделению. Процессом, влияющим на кинетику «растворения-выделения» интерметаллидов в металлической матрице, является динамическое старение, активизирующееся при увеличении температуры и снижении скорости деформации.

Деформационное растворение интерметаллидов объясняется миграцией деформационно-индуцированных межузельных атомов из частицы в матрицу в поле напряжений движущихся дислокаций, которая сменяется ускоренным точечными дефектами выделением интерметаллидов при повышении температуры деформации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00908).

## Различия в состоянии атомов железа в наночастицах в циркониевых сплавах при малых и больших содержаниях железа

Филиппов В.П.<sup>1</sup>, Хасанов А.М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва (Россия)

<sup>2</sup>Университет северной Каролины, Эшвилль (США)

vpfilippov@mephi.ru

### Differences in iron state in nanoparticles in zirconium alloys with small and large iron contents

Filippov V.P., Khasanov A.M.

Mössbauer spectroscopy was applied to study the formation nanoparticles and their transformation under annealing. Influence of zirconium doping to iron stabilizes grain growth and decreases the activation energy for growth.

Циркониевые сплавы нашли широкое применение в технике. Используются сплавы как с малым содержанием железа, так с повышенным содержанием, куда цирконий входит как легирующая добавка. Для получения необходимых свойств сплавов в них добавляют легирующие элементы и проводят термомеханические обработки. В циркониевых сплавах образуются выделения, которыми могут быть различные интерметаллидные соединения сложного и переменного состава. При малых концентрациях железа при закалке с бета-области образуются пересыщенные твердые растворы железа и частицы интерметаллидных соединений. Параметры мёссбауэровских спектров пересыщенного твердого раствора близки к параметрам твердого раствора железа в альфа-цирконии. В процессе отжига происходит распад пересыщенного твердого раствора на твердый раствор и интерметаллидные соединения. В отличие от обычных металлических систем, в которых образуются только твердые растворы замещения, в циркониевых сплавах возможно образование и твердых растворов внедрения. Скорость процесса распада зависит от присутствия третьих элементов в сплаве и, как правило, при наличии третьего элемента она снижается. При механическом перемалывании железа с добавками циркония образуются наноразмерные кристаллы. Добавки циркония влияют на процессы роста наночастиц и энергию активации роста частиц. Показано, что при отжигах в сплавах, как с малым, так и с большим содержанием железа происходят структурно-фазовые превращения. Выявлено изменение энергии активации роста частиц при добавлении циркония в железо. Мёссбауэровские данные дают основание предполагать, что в сплавах с большим содержанием железа цирконий выделяется по границам зерен в нанокристаллах железа.

# Низкотемпературные исследования наночастиц ферригидрита методом мёссбауэровской спектроскопии

Столяр С.В.<sup>1,2</sup>, Байюков О.А.<sup>1</sup>, Исхаков Р.С.<sup>1</sup>, Ярославцев Р.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики СО РАН, Красноярск (Россия)

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, Красноярск (Россия)

stol@iph.krasn.ru

## Low-temperature studies of ferrihydrite nanoparticles using Mössbauer spectroscopy

Stolyar S.V., Bayukov O.A., Iskhakov R.S., Yaroslavtsev R.N.

Ferrihydrite nanoparticles were studied by Mössbauer spectroscopy in the temperature range from 4 to 290 K. It is shown that the occupation of iron positions essentially depend on temperature.

В работе изучены наночастицы ферригидрита методом мёссбауэровской спектроскопии. Наночастицы были получены в результате гидролиза соли железа. Размер частиц составлял 2 нм. Температура блокировки составляет  $T \approx 50$  К. Частицы ферригидрита содержат три неэквивалентные позиции железа: Fe1 занимают sdвоенные слои лигандов с кубической (ABCABC) упаковкой; Fe2 – одиночные слои с гексагональной (ABAB) упаковкой; Fe3 – катионы, вышедшие в межслойное пространство [1, 2]. Обнаружено, что заселенности позиций зависят от температуры (рис. 1).

Работа поддержана Специальной программой Министерства Образования и Науки Российской Федерации для Сибирского Федерального Университета.

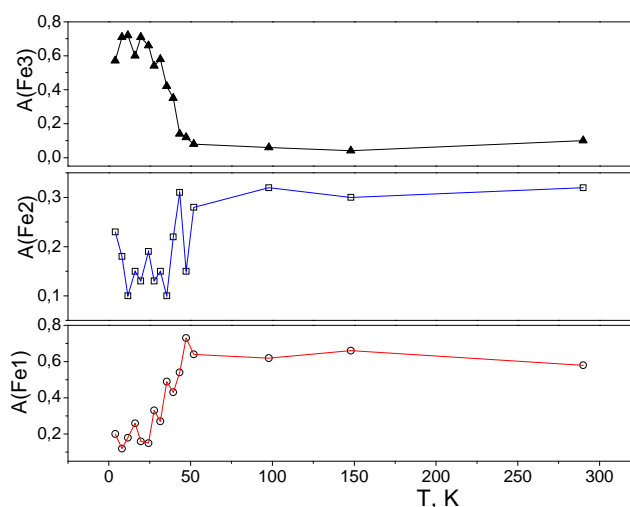


Рис. 1. Зависимость заселенности позиций железа от температуры

### ЛИТЕРАТУРА

1. Jansen E. The structure of six-line ferrihydrite / E. Jansen, A. Kyek, W. Schafer, U. Schwertmann // Appl. Phys. A: Mater. Sci. & Process. – 2002. – V. 74. – P. 1004–1006.
2. Stolyar S.V. Mössbauer study of bacterial ferrihydrite / S.V. Stolyar, O.A. Bayukov, Y.L. Gurevich, V.P. Ladygina, R.S. Iskhakov, P.P. Pustoshilov // Inorg. Mater. – 2007. – V. 43. – P. 638.

*Topic IV*  
*Biological and medical applications*



## СВЯЗЫВАНИЕ КАТИОНОВ $^{57}\text{Co}^{2+}$ В АКТИВНЫХ ЦЕНТРАХ ФЕРМЕНТОВ: ВОЗМОЖНОСТИ ЭМИССИОННОЙ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ЭНЗИМОЛОГИИ

**Камнев А.А.<sup>1</sup>, Тугарова А.В.<sup>1</sup>, Куликов Л.А.<sup>2</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*ФГБУН Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов Российской академии наук, Саратов (Россия)*

<sup>2</sup>*ФГБОУ ВО Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

aakamnev@ibppm.ru; a.a.kamnev@mail.ru

### Binding of $^{57}\text{Co}^{2+}$ cations in enzyme active centres: potentials of emission Mössbauer spectroscopy in enzymology

Kamnev A.A., Tugarova A.V., Kulikov L.A., Perfiliev Yu.D.

Applications and potentials of  $^{57}\text{Co}$  emission Mössbauer spectroscopy are discussed for studying sophisticated biocomplexes including metalloenzymes with  $^{57}\text{Co}^{2+}$ -doped active centers having two and more different types of cation-binding sites.

В серии наших предшествующих работ было показано, что с помощью эмиссионного варианта мёссбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Co}$  (ЭМС) можно получать уникальную структурную информацию о биокомплексах различной сложности [1–3]. Впервые были изучены образцы фермента (бактериальной глутаминсинтетазы) с двумя различными типами сайтов связывания катионов (ССК) в активных центрах (см. обзор [1]). В продолжение данных работ методом ЭМС был изучен фермент щелочная фосфатаза после допирования катионами  $^{57}\text{Co}^{2+}$  его активных центров, отличающихся наличием большего числа ССК.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Kamnev A.A. Emission ( $^{57}\text{Co}$ ) Mössbauer spectroscopy: biology-related applications, potentials, and prospects / A.A. Kamnev // Mössbauer Spectroscopy: Applications in Chemistry, Biology, and Nanotechnology (V.K. Sharma, G. Klingelhöfer, T. Nishida, Eds.). – N.Y.: Wiley, 2013. – Chapter 17. – P. 333–347.
2. Kamnev A.A. Emission ( $^{57}\text{Co}$ ) Mössbauer spectroscopy as a tool for probing speciation and metabolic transformations of cobalt(II) in bacterial cells / A.A. Kamnev, A.V. Tugarova, K. Kovács, E. Kuzmann, B. Biró, P.A. Tarantilis, Z. Homonnay // Anal. Bioanal. Chem. – 2013. – V. 405. – N 6. – P. 1921–1927.
3. Kamnev A.A. Cobalt(II) complexation with small biomolecules as studied by  $^{57}\text{Co}$  emission Mössbauer spectroscopy / A.A. Kamnev, Yu.D. Perfiliev, L.A. Kulikov, A.V. Tugarova, K. Kovács, Z. Homonnay, E. Kuzmann // Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. – 2016. – DOI: 10.1016/j.saa.2016.04.031.

## Magnetic nanoparticles for “theranostic” biomedical applications

**Kamzin A.S.**

*Ioffe Physical-Technical Institute of RAS, St.-Petersburg (Russia)*

Kamzin@mail.ioffe.ru

This review gives a short overview of the research results achieved for magnetic nanoparticles in the last years as well as the research activities in progress, especially in regard to superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONs). This is attempt to highlight the most popular and efficient synthesis approaches for magnetic nanoparticles, which can be used in biomedical fields, such as hyperthermia, magnetic resonance imaging (MRI) and drug delivery.

Magnetic nanomaterials have attracted great attention from many research fields. Due to their superparamagnetic property and low toxicity, magnetic iron oxide ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$  and  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) nanoparticles (MIONP) are especially interesting to biomedical applications, such as diagnostic magnetic resonance imaging (MRI), magnetic hyperthermal therapy, and drug delivery. For these applications,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  and  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  nanoparticles are usually smaller than 20 nm, where they exhibit superparamagnetic properties, i.e. a high magnetic saturation moment and nearly zero coercivity at room temperature. The external magnetic field can readily induce self-heating (hyperthermal effect) of iron oxide nanoparticles, and also move magnetic nanoparticles along the field. These behaviors actually highly depend on the quality of the iron oxide nanoparticles, such as crystallization, size, and shape. It indicates the importance of synthesis approaches of iron oxide nanoparticles, i.e. the synthesis approaches that can produce well-crystallized and size-controlled iron oxide nanoparticles offer more opportunities for these applications. On the other hand, after synthesis, iron oxide nanoparticles need surface modification to make them more compatible in biosystems for molecular conjugation, functionalization, bio-compatible and stable. Therefore, the techniques for building a strong, but biocompatible surface protection layer are highly desirable.

In review considered applications of Mössbauer methods for characterization and control at different stages of the preparation process of nanostructured materials and their evolution under different post growing treatments. Mössbauer spectroscopy can provide valuable information on the behavior of superparamagnetic iron oxide nanoparticles.

The advantages of surface modification are demonstrated with several MRI, hyperthermia and drug delivery examples. In addition, building smart structures with the abilities of diagnosis and therapeutics based on magnetic nanoparticles and SPIONs are considered.

## О возможности использования эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии для выявления химических канцерогенов

**Бяков В.М.<sup>1,3</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>1</sup>, Куликов Л.А.<sup>1</sup>, Степанов С.В.<sup>1,2,4</sup>**

<sup>1</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва (Россия)

<sup>2</sup>ГНЦ РФ ИТЭФ, Москва (Россия)

<sup>3</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, (Россия)

<sup>4</sup>Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва (Россия)

byakov@itep.ru

### Emission Mössbauer spectroscopy and testing for potential chemical carcinogens

Byakov V.M., Perfiliev Yu. D., Kulikov L.A., Stepanov S.V.

A method for detection of carcinogenic properties of chemical substances based on the Emission Mössbauer Spectroscopy is briefly discussed.

Основной причиной онкологических заболеваний считается попадание в организм человека химических канцерогенов. Поэтому разработка способов их быстрого детектирования – актуальная задача. Многие химические канцерогены – сильные электрофилы. Мерой электрофильности может служить величина константы скорости их реакции с электронами, определяемая в условиях импульсного радиолитического распада. Но позитронная спектроскопия более предпочтительна [1]. Быстрый позитрон ( $e^+$ ), проходя через конденсированную среду, в конце своего трека (в области пика Брэгга) оказывается в окружении многих вторичных электронов  $e^-$ . Реагируя с одним из них,  $e^+$  с высокой вероятностью образует атом позитрония:  $e^+ + e^- \Rightarrow Ps$  (1). Но в концентрированном растворе канцерогена S реакция (1) подавляется:  $S + e^- \Rightarrow S^-$ . И атом Ps практически не образуется.

Биофизические данные указывают, что средой, моделирующей внутриклеточную, могут служить замороженные стеклообразные растворы. Мы показали, что процессы, инициируемые распадом ядер  $^{57}Co$ , схожи с теми, что происходят в треках быстрых позитронов. Реакция образования ионов  $^{57}Fe^{2+}$ , сходна с (1):  $^{57}Fe^{3+} + e^- \Rightarrow ^{57}Fe^{2+}$  [2]. Поэтому для выявления химических канцерогенов можно использовать эмиссионную мёссбауэровскую спектроскопию. Таким образом, мёссбауэровская и позитронная спектроскопии оказываются взаимодополняющими методами.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Byakov V.M.* PAL spectroscopy and testing for potential carcinogens / V.M. Byakov, S.V. Stepanov, et. al. // Phys. Stat. Sol. C. – 2009. – V.6. – № 11. – P. 2503-2506.

2. *Степанов С.В.* Изучение поведения трековых электронов в замороженных водных растворах методом ЭМС / В.М. Бяков, Ю.Д. Перфильев, Л.А. Куликов // Изв. РАН. Сер. физ. – 2013. – Т. 77. – № 6. – С. 847-851.

## Мёссбауровское изучение цианобактерий *Spirulina platensis*

Перфильев Ю.Д., Коннычев М.А., Тамбиев А.Х.

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

maxim-kedr@mail.ru

### Mössbauer study of cyanobacterium *Spirulina platensis*

Perfiliev Yu.D., Konnychev M.A., Tambiev A.Kh.

Dry biomass of *Spirulina (Arthrospira) platensis* was investigated by Mössbauer spectroscopy. It is established that the form of *Spirulina* iron is a modification of ferrihydrite.

Мёссбауэровская спектроскопия широко используется для исследования состояний и превращений соединений железа в биологических объектах. В настоящей работе фототрофная цианобактерия *Spirulina (Arthrospira) platensis* культивировалась на минеральной среде Заррука с целью изучения отдельных метаболических процессов с участием железа, которое находилось в среде в виде комплекса с ЭДТА (контроль). Срок культивирования – 21 день.

Дополнительное железо по отношению к контрольной концентрации вводилось в фазе экспоненциального роста (7 суток). По окончании культивирования биомасса *S. platensis* фильтровалась, подсушивалась на проточном воздухе (70 °С, 20–25 минут) и помещалась в фальконы с молекулярными ситами СаА для полного высушивания.

Основной дублет, проявляющийся во всех спектрах, имеет изомерный сдвиг в пределах 0.32–0.35 мм/с и квадрупольное расщепление в пределах 0.5–0.6 мм/с (рис. 1). Как и для ряда биологических объектов, включение железа в клетки цианобактерий следует ожидать в форме кислородных соединений – гидроксидов. Для них по изомерному сдвигу состояние ионов железа можно приписать иону  $Fe^{3+}$ , находящемуся в октаэдрической позиции. С меньшей интенсивностью в спектрах определяется другой дублет с таким же изомерным сдвигом, но с большим квадрупольным расщеплением (1.0–1.1 мм/с). Близкие к этим значениям параметры имеет ферригидрит.

При избыточном количестве железа (более 25 мкг/мл) в культуральной среде отчетливо виден бурый осадок, параметры которого также мало отличаются от параметров ферригидрита (рис. 2), но соотношение двух дублетов резко изменено.

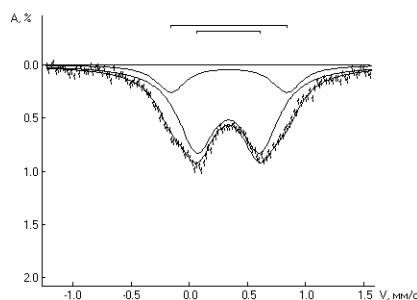


Рис. 1. Спектр образца сухой биомассы *Spirulina*

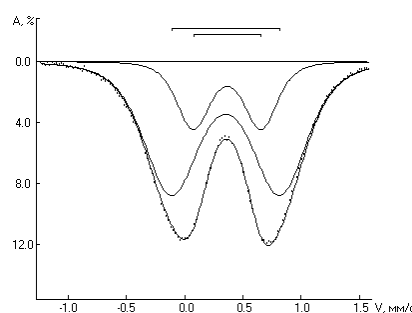


Рис. 2. Спектр осадка, выпадающего при избыточной концентрации вводимого железа

# $^1\text{H}$ ЯМР исследование раствора лекарственного препарата МАКГ

**Ахметов М.М.<sup>1</sup>, Петухов В.Ю.<sup>1,3</sup>, Гумаров Г.Г.<sup>1</sup>, Конов А.Б.<sup>1</sup>,  
Коныгин Г.Н.<sup>2</sup>, Рыбин Д.С.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Казанский Физико-Технический Институт, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Физико-Технический Институт УрО РАН, Ижевск (Россия)

<sup>3</sup>Казанский (Поволжский) Федеральный Университет, Казань (Россия)

mansik86@mail.ru

## $^1\text{H}$ NMR study of the drug solution MACG

Akhmetov M.M., Petukhov V.Yu., Gumarov G.G., Konov A.B., Konygin G.N., Rybin D.S.

NMR spectra of aqueous solution of the novel drug calcium gluconate indicate changes in molecular conformation, whereas the decay of the molecule was not revealed unlike EPR data.

Ранее [1] методом ЭПР нами было показано, что в результате механообработки глюконата кальция в образцах возникают парамагнитные центры, обусловленные деструкцией молекулы с разрывом по связи Ca-O. В настоящей работе приведены результаты ЯМР-исследований водного раствора лекарственного препарата МАКГ (Рис.1).

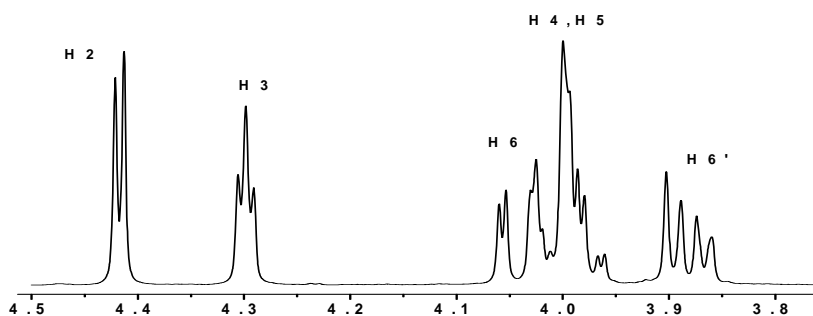


Рис. 1.  $^1\text{H}$  ЯМР спектр раствора МАКГ (50 ммоль)

Представленные результаты свидетельствуют о том, что при механоактивации не происходит разрыва химических связей С-С и С-Н, в количествах, достаточных для регистрации методом  $^1\text{H}$  ЯМР. Однако с изменением концентрации растворов наблюдается небольшое различие в протонных спектрах: в химических сдвигах для группы Н2 и Н3, вследствие влияния межмолекулярной водородной связи [2], а также в значениях константы спин-спинового взаимодействия и в форме группы линий, соответствующих одному из концевых протонов Н6.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Гумаров Г.Г. Образование парамагнитных центров при механохимической обработке глюконата кальция / Г.Г. Гумаров, В.Ю. Петухов, Г. Н. Коньгин и др. // Журнал физической химии. – 2013. – Т. 87. – С. 1-4.

3. Марч Дж. Органическая химия / Дж. Марч – М.: Мир, – 1987. – 381 с.

## Перераспределение экзогенного железа между мозгом и селезенкой после введения $^{57}\text{Fe}_3\text{O}_4$ феррожидкости в мозговой желудочек крысы

Поликарпов Д.М.<sup>1</sup>, Габбасов Р.Р.<sup>2</sup>, Черепанов В.М.<sup>2</sup>, Чуев М.А.<sup>3</sup>,  
Логинава Н.А.<sup>4</sup>, Лосева Е.В.<sup>4</sup>, Никитин М.П.<sup>5</sup>, Панченко В.Я.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Clinical Medicine, Faculty of Medicine and Health Science, Macquarie University, NSW (Australia)*

<sup>2</sup>*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow (Russia)*

<sup>3</sup>*Institute of Physics and Technology, RAS, Moscow (Russia)*

<sup>4</sup>*Institute of Higher Nervous Activity and Neurophysiology, RAS, Moscow (Russia)*

<sup>5</sup>*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny (Russia)*

gabbasov\_rr@nrcki.ru

## Exogenous iron redistribution between brain and spleen after administration of $^{57}\text{Fe}_3\text{O}_4$ ferrofluid in the ventricle of rat brain

Polikarpov D.M., Gabbasov R.R., Cherepanov V.M., Chuev M.A.,  
Loginova N.A., Loseva E.V., Nikitin M.P., Panchenko V.Y.

Drug delivery through the blood-brain barrier (BBB) is a challenge in the treatment of brain's disorders. Magnetic nanoparticles are considered to be one of the possible delivery systems for passing through the BBB and the study of the biodegradation and/or clearance of the magnetic nanoparticles from the brain is the key task to support the safety of this medical technology. We used a recently developed method based on joint analysis of the Mössbauer for precise characterization of  $^{57}\text{Fe}$ -enriched iron oxide nanoparticles [1]. Using this technique together with histological data we able to quantitatively describe the biodegradation processes and iron redistribution in the rat brain and spleen and to estimate concentrations of exogenous and endogenous iron.

Магнитные наночастицы считаются одним из возможных компонентов систем доставки лекарственных средств через гематоэнцефалический барьер. В предыдущих работах мы разработали метод оценки распределения и скорости выведения магнитных частиц из организма на основе совместного анализа группы мёссбауэровских спектров одного образца в рамках единой модели магнитной динамики [1]. В докладе представлены результаты подробного изучения параллельных процессов биодegradации магнитных наночастиц в мозге и селезенке после введения обогащенной изотопом  $^{57}\text{Fe}$  феррожидкости в желудочек головного мозга крыс. Работа была частично поддержана РФФИ, грант № 15-02-08171-а.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Gabbasov R.R. Biodegradation of magnetic nanoparticles in mouse liver from combined analysis of Mössbauer and magnetization data / R.R. Gabbasov, V.M. Cherepanov, M.A. Chuev et al. // IEEE Trans. Magn. – V. 49. – №. 1. – 2013. – pp. 394 – 397.

## **Mössbauer studies of core/shell nanoparticles based on Fe–Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> for biomedical applications**

**Kamzin A.S.<sup>1</sup>, Nazipov R.A.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Ioffe Physical-Technical Institute of RAS, St.-Petersburg (Russia)*

<sup>2</sup>*Kazan National Research Technological University, Kazan (Russia)*

Kamzin@mail.ioffe.ru

Hyperthermia is a promising method for generating heat, including that for therapeutic treatment of cancers at elevated temperatures (from 42 to 45°C), which in the last decade has been widely used for different purposes. The efficiency of magnetic hyperthermia, as method of heating with magnetic particles, depends on the composition of nanoparticle, their size, magnetic properties, and degree of aggregation. For biomedical applications it needs to use not only more effective magnetic nanoparticles, which have a high saturation magnetization and make it possible to decrease the dose of introduced nanoparticles, but also so-called “theranostic” nanoparticles in the biomedical field, which are able to carry out simultaneously diagnosis and therapeutic functions in diseased areas of the human body.

In this work, we have investigated the structure and magnetic properties of Fe/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic nanoparticles of the core/shell type which are promising new objects for biomedicine. Interest in these particles is caused by their high degree of crystallization and chemical stability in the low and high-frequency alternating magnetic fields.

Magnetic nanoparticles of Fe/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> synthesized by the solar physical vapor deposition have been studied. Targets have been prepared from tablets pressed from Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> or Fe powders. Relationships between the structure of nanoparticles and their magnetic properties have been investigated in order to understand principles of the control of the parameters of magnetic nanoparticles. Mössbauer investigations have revealed that the nanoparticles synthesized from pellets of both pure iron and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> consist of two phases: pure iron and iron oxides. The high iron oxidability suggests that the synthesized nanoparticles have a core/shell structure, where the core is pure iron and the shell is an oxidized iron layer. The synthesized nanoparticles have a higher heat performance than Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> or Fe particles separately. A high heat release efficiency of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> particles will allow the use of smaller amounts of a biomagnet for clinical application in hyperthermia therapy. Thus, nanoparticles of the core/shell (Fe/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) type form a class of materials with a high hyperthermic effect. Preliminary estimates demonstrated that the parameters of core/shell particles are one order of magnitude higher than the corresponding parameters of the individual magnets forming these particles.

## Сравнительное мёссбауэровское исследование структурного состояния биогенных и синтезированных наночастиц гетита

Новакова А. А., Должикова А. В.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва (Россия)*

*novakova.alla@gmail.com, dol\_nas@mail.ru*

### Comparative Mössbauer analysis of biogenic and chemically prepared goethites structural state

Novakova A.A., Dolzhikova A.V.

Comparative analysis of biogenic and chemically prepared goethites structural state, morphology and particles sizes was performed by means of Mössbauer spectroscopy, X-ray diffraction, and SEM.

В данной работе сравниваются структурные, размерные и морфологические характеристики биогенных гетитов, выделенных из коры выветривания Дальнего Востока и Вьетнама и наночастиц гетита, полученных гидротермальным способом.

Морфология частиц была исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии, а структура была определена электронографически.

Для того чтобы определить чистоту и состав примесей в биогенных гетитах были сняты рентгеновские дифрактограммы. Было показано, что у этих образцов состав примесей отличается, у вьетнамского биогенного гетита преобладают примеси гиббсита  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , а у дальневосточного преобладают примеси каолинита  $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_9\text{H}_4$ .

Оценка размеров частиц была проведена с помощью измерения мёссбауэровских спектров при комнатной и азотной температурах. Спектры биогенных гетитов при комнатной температуре имеют релаксационную форму со средним эффективным магнитным полем 280 кЭ и интенсивным парамагнитным дублетом с изомерным сдвигом 0.37 мм/с и квадрупольным расщеплением 0.7 мм/с, а при азотной температуре наблюдается сверхтонкое расщепление со средним эффективным магнитным полем 486 кЭ. Математический анализ мессбауэровских спектров биогенных гетитов помог установить, что размеры частиц вьетнамского образца больше размеров частиц дальневосточного образца. Размер частиц гетита, приготовленных гидротермальным способом, оказался значительно бóльшим, так как при комнатной температуре в спектре наблюдается только сверхтонкое магнитное расщепление со средним эффективным магнитным полем 386 кЭ.

Таким образом, размеры биогенных гетитов существенно более мелкие, чем размеры частиц, полученных гидротермальным способом.



## **Мёссбауэровские исследования накопления наноразмерных частиц гидроксида железа в организме лабораторных животных**

**Семенов В.Г.<sup>1</sup>, Панчук В.В.<sup>1</sup>, Мурин И.В.<sup>1</sup>, Королев Д.В.<sup>2,3</sup>, Афонин М.В.<sup>3</sup>, Торопова Я.Г.<sup>3</sup>, Печникова Н.А.<sup>2,5</sup>, Галагудза М.М.<sup>2,3</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург (Россия)

<sup>2</sup> ФГБУ «Северо-западный федеральный медицинский исследовательский центр»,  
Санкт-Петербург (Россия)

<sup>3</sup> Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. акад.  
И.П. Павлова, Санкт-Петербург (Россия)

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург  
(Россия)

<sup>5</sup> Санкт-Петербургская государственная химико-фармакологическая академия,  
Санкт-Петербург (Россия)

val\_sem@mail.ru

## **Mössbauer study of iron hydroxide particles accumulation in laboratory animals**

**Semenov V.G., Panchuk V.V., Murin I.V., Korolev D.V., Afonin M.V., Toropova Ya.G.,  
Pechnikova N.A., Galagudza M.M.**

In this work we applied Mössbauer spectroscopy to study the distribution of colloid particles containing  $^{57}\text{Fe}$  in different organs of laboratory animals after intravenous injection. Quantitative data on accumulation and excretion of colloid particles from different organs (liver, kidneys, lungs, milt, heart and brain) were obtained. The difference was observed in the areas under the resonance peaks. Spectral decomposition into individual parts shows that magnetically ordered state (without magnetic sextets) is almost absent in lungs and liver.

В настоящее время достигнуты значительные успехи в использовании магнитных наночастиц в медицине. Наиболее широкое применение в биомедицине получили магнитные наночастицы на основе железа, что обусловлено их низкой токсичностью и стабильностью физических характеристик.

В работе с помощью мёссбауэровской спектроскопии изучалось распределение по нескольким органам коллоидных частиц, содержащих изотоп железа-57, после внутривенного введения лабораторным животным. Относительное распределение атомов железа по различным органам мы получали из определения площади под резонансной частью спектра. При этом обязательно проводилась нормировка спектров для учета разного количества вещества для разных органов. Дополнительно велся контроль изменения поглощения в зависимости от толщины образца по амплитудному спектру.

Получены количественные данные о накоплении и последующем выведении коллоидных частиц для различных органов: печень, почки, лёгкие, селезёнка, сердце и мозг.

## Мёссбауэровское исследование комплексообразования железа с меланином чаги

Уразлина Л.Н.<sup>1</sup>, Пятаев А.В.<sup>2</sup>, Хабибрахманова В.Р.<sup>1</sup>, Сысоева М.А.<sup>1</sup>, Гараев Р.Р.<sup>1</sup>,  
Ахмеджанов И.Д.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский национальный исследовательский университет, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Казанский федеральный университет, Казань (Россия)

151Eu@mail.ru

### Mössbauer study of chaga melanin complexation by iron

Urazlina L.N., Pyataev A.V., Khabibrakhmanova V.R., Sysoeva M.A., Garayev R.R.,  
Akhmedzhanov I.D.

In the present study we investigated hyperfine interactions and local environment of iron ions in the iron-based composite of chaga melanin.

Композиты на основе меланина обладают различными видами биологической активности: антиоксидантной, противовирусной, иммуномодулирующей и др. В настоящее время актуальной задачей является модификация меланина чаги с целью получения функциональных материалов с повышенной биологической активностью. Также является важным изучение связывания железа путем комплексообразования с меланином ввиду каталитической активности ионов  $Fe^{2+}$  при перекисном окислении органических веществ (реакция Фентона). Целью исследования таких композитов является определение механизмов взаимодействия и идентификация типов комплексов железа с функциональными группами меланина. В работе методами мёссбауэровской спектроскопии был исследован композит, полученный путем взаимодействия насыщенного раствора  $FeSO_4$  со свежесажженным меланином чаги в диапазоне температур 25–300 К. Спектры представляют собой суперпозицию двух квадрупольных дублетов соответствующих  $Fe^{3+}$  и  $Fe^{2+}$  парамагнитным центрам с отношением парциальных площадей равным  $\sim 7 \div 1$  соответственно. Понижение температуры приводит к возникновению магнитного порядка в системе высокоспиновых  $S = 5/2$   $Fe^{3+}$  центров только при температурах около 25 К, в отличие от известных примеров комплексов меланинов природного [1] и животного происхождения [2].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Багиров Р.М. Комплексообразования ионов железа с меланином растительного происхождения / Р.М. Багиров и др. // Fizikanın müasir problemləri VIII Respublika konfransı «II völmə kondensə olunmuş mühit fizikası», Bakı – 2015. –P. 107-110.
2. Double K.L. Iron-binding characteristics of neuromelanin of the human substantia nigra / K. L. Double et al. // Biochem. Pharm. – 2003. – V. 66. – №. 3. – P. 489-494.

*Topic V*

*Chemistry, petroleochemistry, catalysis, structure and chemical bond*

# Мёссбауэровская спектроскопия зондовых катионов $^{119}\text{Sn}$ на поверхности кристаллитов $\text{ZnO}$ : электронное состояние, локальное окружение и химические реакции примесных добавок олова

Афанасов М.И.<sup>1</sup>, Короленко М.В.<sup>1</sup>, Фабричный П.Б.<sup>1</sup>, Ружье А.<sup>2</sup>, Лабрюжер К.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>CNRS – Université de Bordeaux, ICMCB, Pessac (France)

<sup>3</sup>CNRS – Université de Bordeaux, PLACAMAT UMS 3626 (France)

pf@radio.chem.msu.ru

## Mössbauer spectroscopy of $^{119}\text{Sn}$ probe cations located on the surface of $\text{ZnO}$ crystallites: electronic state, local surrounding and chemical reactions of tin dopant

Afanasov M.I., Korolenko M.V., Fabritchnyi P.B., Rougier A., Labrugère C.

$^{119}\text{Sn}^{2+}$  dopant ions were for the first time stabilized on the surface of wurtzite-type  $\text{ZnO}$  – an oxide involving tetrahedrally coordinated metallic sites. This has allowed us not only to characterize the pristine electronic state and local surrounding of the  $^{119}\text{Sn}$  probe but also follow their evolution during chemical reactions of the dopant with different gases.

Разработан метод синтеза образцов  $\text{ZnO}:0.3 \text{ ат. \% } ^{119}\text{Sn}$ , позволивший впервые локализовать зондовые атомы олова на поверхности оксида, содержащего *тетраэдрически* координированные катионы. Заселение поверхностных позиций ионами  $\text{Sn}^{2+}$  происходит при нагревании в  $\text{H}_2$  ( $320 < T < 400$  °C) образцов, содержавших ионы  $\text{Sn}^{2+}$  в объеме частиц. В полученных *in situ* мёссбауэровских спектрах  $^{119}\text{Sn}$ , выход олова на поверхность отражен появлением уширенной дублетной компоненты с изомерным сдвигом и квадрупольным расщеплением, отвечающими следующим усредненным значениям:  $\delta \cong 2.8$  мм/с и  $\Delta E_Q \cong 2.0$  мм/с. Эти значения указывают на стереохимическую активность неподеленной электронной пары олова и, соответственно, на присутствие  $\text{Sn}^{2+}$  в координационно-ненасыщенных позициях. Локализация  $\text{Sn}^{2+}$  на поверхности кристаллитов подтверждена спектрами  $^{119}\text{Sn}$ , полученными после экспозиции  $\text{ZnO}:\text{Sn}^{2+}$  на воздухе, а также – в атмосфере  $\text{H}_2\text{S}$ , обнаружившими легкую доступность  $\text{Sn}^{2+}$  для молекул газовой среды. Заселение ионами  $\text{Sn}^{2+}$  поверхностных позиций также проявилось при анализе рентгеновских фотоэлектронных спектров образцов  $\text{ZnO}:\text{Sn}$ , отожженных в  $\text{H}_2$ . Таким образом, наши данные позволяют считать вюрцитную модификацию  $\text{ZnO}$  субстратом нового типа пригодным для исследования поверхности с применением зондовых ядер  $^{119}\text{Sn}$ .

Настоящая работа поддержана грантом РФФИ (проект № 16-03-00003).

## О некоторых аспектах идентификации степени окисления железа по мёссбауэровским изомерным сдвигам

Дедушенко С.К.<sup>1</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Лялин пер. 24/26-43, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

dedushenko@mail.ru

### On the identification of iron oxidation state by Mössbauer isomer shifts

Dedushenko S.K. and Perfiliev Yu.D.

Correlations isomer shift - iron oxidation state have been compared for a number of compounds of high-spin and low-spin iron, some regularities being observed.

Хорошо известно, что изомерный сдвиг (IS) зависит от степени окисления железа (OS), его спинового состояния и прочих факторов. Однако определение OS по IS сталкивается с рядом сложностей. Например, красная кровяная соль,  $K_3[Fe(CN)_6]$ , является классическим примером соединения низкоспинового железа(III). Однако ее IS находится между сдвигов низкоспиновых комплексов железа(II) - нитропрусида натрия,  $Na_2[Fe(CN)_5NO] \cdot 2H_2O$ , и желтой кровяной соли,  $K_4[Fe(CN)_6] \cdot 3H_2O$ . При этом, прямых доказательств того, что железо в красной кровяной соли находится в степени окисления +3 нами в литературе не найдено. Если же рассмотреть комплексные анионы  $[Fe(CN)_5(NO^+)]^{2-}$ ,  $[Fe(CN)_5(CN^0)]^{3-}$  и  $[Fe(CN)_5(CN^-)]^{4-}$  как ряд производных низкоспинового железа(II), интерпретация IS упрощается; изменение IS может быть легко объяснено увеличением акцепторных свойств одного из лигандов в ряду  $NO^+ \gg CN^0 \gg CN^-$ .

Для внесения ясности в эту и другие подобные проблемы целесообразно строить корреляции, связывающие IS и OS для разных классов родственных соединений. Мы построили несколько таких корреляций и обнаружили, что для ряда соединений высокоспинового железа OS и IS связаны соотношением:

$${}^{RT}IS_{\alpha-Fe} \approx -0.33 \cdot OS + 1.11 \quad [мм \cdot с^{-1}]$$

Изменения IS на величины, кратные коэффициенту  $\nabla = 0.33 \div 0.34 \text{ мм} \cdot \text{с}^{-1}$  наблюдаются в процессах окисления-восстановления железа, находящегося как в высокоспиновом, так и в низкоспиновом состоянии.

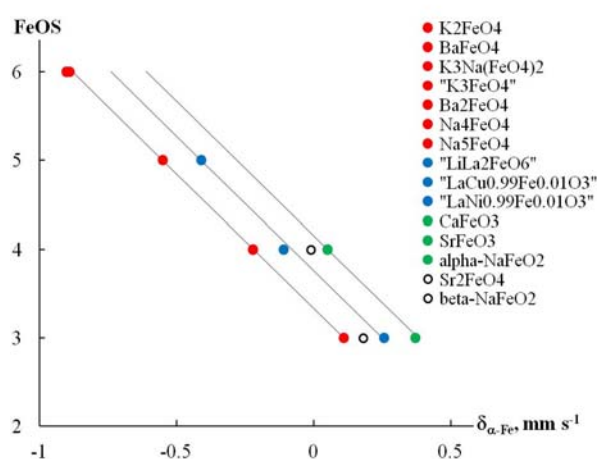


Рис. 1. Взаимосвязь OS и IS для оксидов различной природы

# ИЗОТОПНЫЙ ЭФФЕКТ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ ОКСИДА ЖЕЛЕЗА ВОДОРОДОМ

**Перфильев Ю.Д.<sup>1</sup>, Балдохин Ю.В.<sup>2</sup>, Куликов Л.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Химфак МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Институт химической физики им. Н.Н.Семенова, Москва (Россия)*

perf@radio.chem.msu.ru

## Isotope effect for iron oxide reduction by hydrogen

Perfiliev Yu.D., Baldokhin Yu.V., Kulikov L.A.

Existence of magnetic isotope effect was established by means of the Mössbauer effect in reduction reaction of iron oxide by hydrogen.

Существование магнитного изотопного эффекта подтверждается многими экспериментальными данными [1]. В данной работе представлены результаты восстановления в водороде образцов с различным содержанием изотопа <sup>57</sup>Fe. Образцы оксида железа Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> были приготовлены высушиванием гидроксида железа, а восстановление вели в токе водорода при 500 °С. Мёссбауэровские спектры представлены на рис. 1. Параметры спектров сведены в таблицу 1. Из нее следует, что образование металлического железа происходит легче в образце 1 и, вероятно, связано со спиновыми взаимодействиями.

Таблица 1. Параметры спектров (комн. температура)

Образцы Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Формы железа	δ, мм/с, отн. α-Fe	Δ, мм/с	H <sub>эф</sub> , кЭ	S, % (3)
1.(2% <sup>57</sup> Fe)	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.41(1)	-0.16(1)	513(1)	40
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	0.33(2)	-0.06(2)	490(1)	20
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	0.67(2)	-0.10(3)	455(1)	7
	Fe	0.06(1)	0.01(1)	333(1)	33
2.(95% <sup>57</sup> Fe)	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.42(1)	-0.14(1)	514(1)	36
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	0.38(1)	-0.01(1)	489(1)	38
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	0.67(1)	-0.04(1)	454(1)	17
	Fe	0.09(1)	-0.01(1)	333(1)	8

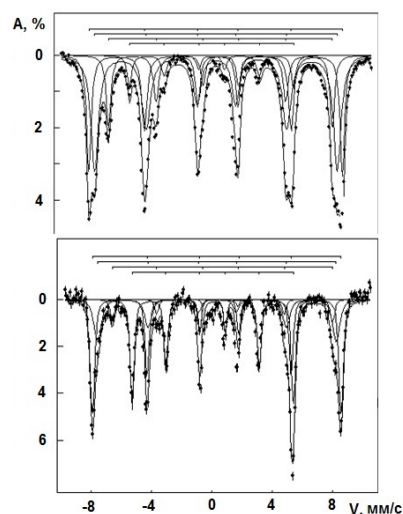


Рис. 1. Спектры образцов 1 (снизу) и 2 (сверху)

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 15-08-04881).

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Buchachenko A.L.* Mass-independent isotope effects / A.L. Buchachenko // *J. Phys. Chem. B.* – 2013. – V. 117. – № 8. – P. 2231-2238.

## Zn-замещенные ферриты стронция со структурой типа браунмиллерита

**Похолок К.В., Филимонов Д.С., Розова М.Г., Тябликов О.А.**

*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва (Россия)*

kpokholok@gmail.com

### Zn-substituted strontium iron brownmillerites

Pokholok K.V., Filimonov D.S., Rozova M.G., Tyablikov O.A.

The solid solutions  $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{2.5}$  ( $0.0 < x < 0.4$ ) were prepared by various techniques at different temperature/atmosphere conditions. The cations distributions among the tetrahedral and octahedral sites were investigated by absorption Mössbauer spectroscopy.

Методом мёссбауэровской спектроскопии исследованы особенности распределения катионов по подрешеткам браунмиллеритных фаз  $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{2.5}$  ( $0.0 < x < 0.4$ ). Образцы ряда твердых растворов  $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{2.5}$  получены как твердофазным синтезом из соответствующих количеств оксидов Fe, La, Zn и  $\text{SrCO}_3$ , так и модернизированным методом Печини, в котором использовались растворы цитратов соответствующих катионов. На конечном этапе спрессованные в таблетки образцы отжигались на воздухе при  $T = 1473$  К в течении 24 часов, после чего закаливались на воздух или в жидкий азот. В спектрах этих образцов чётко видны линии  $\text{Fe}^{4+}$ . Количество четырёхвалентного железа зависит от метода закалки. Последующий отжиг этих образцов в атмосфере Ar при 973 К позволил получить однофазные образцы, в которых всё железо трёхвалентно. Их спектры, измеренные при  $T = 78$  К, представляют собой суперпозицию трёх подспектров по типу и сверхтонким параметрам близких к спектрам  $\text{Fe}^{3+}$ , занимающим тетраэдрические, пентагональные и октаэдрические позиции в родственных перовскитоподобных соединениях.

Дальнейший отжиг в восстановительной атмосфере ( $\text{H}_2 + \text{Ar}$ ) при различных температурах для различных степеней замещения  $\text{Fe}^{3+}$  на  $\text{Zn}^{2+}$  позволил получить однофазные образцы, которые имели кристаллическую структуру типа браунмиллерита. Спектры этих образцов, измеренные при 78 К, представляют собой суперпозицию двух уширенных подспектров, соответствующих катионам  $\text{Fe}^{3+}$ , в октаэдрической и тетраэдрической кислородной координации. Подспектры достаточно хорошо разрешены относительно друг друга, что позволило определить катионное распределение в структуре браунмиллерита. При относительно малом содержании  $\text{Zn}^{2+}$  ( $x = 0.1; 0.2$  и  $0.3$ ) соотношения площадей подспектров соответствует случаю, когда происходит катионное упорядочение по подрешеткам в структуре браунмиллерита. При этом катионы двухвалентного цинка занимают преимущественно тетраэдрические позиции, а трехвалентного железа полностью октаэдрические и частично тетраэдрические кислородные полиэдры структуры типа браунмиллерита.

Работа поддержана Грантом РФФИ № 16-03-00326.

## Применение мёссбауэровской спектроскопии $^{121}\text{Sb}$ для разграничения влияния добавок хрома и сурьмы на фотокаталитические свойства порошков анатазной модификации $\text{TiO}_2$

**Короленко М.В., Фабричный П.Б., Афанасов М.И., Асташкин Р.А.**

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*  
pf@radio.chem.msu.ru

### Application of $^{121}\text{Sb}$ Mössbauer spectroscopy to discrimination of the effects of Cr and Sb co-dopants on the photocatalytic properties of anatase-type polycrystalline $\text{TiO}_2$

Korolenko M.V., Fabritchnyi P.B., Afanasov M.I., Astashkin R.A.

A set of synthetic anatase-type  $\text{TiO}_2$  samples, simultaneously containing both chromium and antimony co-dopant additives, has been investigated. In all cases, chromium was introduced in the trivalent state in the crystallites bulk whereas heterovalent  $\text{Sb}^{5+}$  ( $\text{Sb}^{3+}$ ) cations were distributed in a different way with respect to the surface, as evidenced by  $^{121}\text{Sb}$  Mössbauer spectroscopy measurements. The presence of  $\text{Sb}^{5+}$  is shown to decrease the Cr catalytic activity, especially in the case when antimony was located at surface sites.

Исследована серия образцов синтетического анатаза, одновременно содержащих модифицирующие добавки хрома и сурьмы. Во всех случаях хром вводился в трехвалентном состоянии в объем частиц, тогда как находившиеся в них гетеровалентные катионы  $\text{Sb}^{5+}$  ( $\text{Sb}^{3+}$ ) имели различное пространственное распределение относительно поверхности. Для определения электронного состояния сурьмы и характера ее распределения в исследованных образцах использована информация, полученная анализом значений параметров мёссбауэровских зондовых катионов  $^{121}\text{Sb}$ , с привлечением данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии об относительном содержании сурьмы и титана в тонких поверхностных слоях. Сравнение фотокаталитической активности охарактеризованных этими двумя методами образцов осуществлялось посредством спектрофотометрического определения степени обесцвечивания раствора метилоранжа при воздействии световых потоков различной длины волны и интенсивности. Установлено, что каталитическая активность образцов возрастала с увеличением содержания хрома, присутствие которого одновременно смещало наблюдавшийся каталитический эффект в видимую область спектра. При этом неожиданно оказалось, что присутствие ионов  $\text{Sb}^{5+}$ , компенсировавших дефицит заряда  $\text{Cr}^{3+}$ , существенно ингибировало воздействие хрома, особенно, когда сурьма находилась в позициях на поверхности кристаллитов.

Настоящая работа поддержана грантом РФФИ (проект № 16-03-00003).



## Мёссбауэровская спектроскопия структурно-фазовых превращений при механосплавлении меди и железа в жидкой среде

**Ерёмина М.А., Ломаева С.Ф., Ульянов А.Л., Елсуков Е.П.**

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск (Россия)*

mrere@mail.ru

### Mössbauer spectroscopy of structural and phase transformations during copper and iron mechanical alloying in liquid medium

**Eremina M.A., Lomayeva S.F., Ul'yanov A.L., Yelsukov E.P.**

The methods of Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction have been used to study the kinetics of structural and phase transformations in Cu + 2 at. %  $^{57}\text{Fe}$  during mechanical activation in liquid media (heptane, distilled water) and subsequent heat treatment (600 и 700 °C).

Процессы механического сплавления (МС) в системе Cu-Fe в области низких концентраций железа (до 2 ат. %) к настоящему времени остаются малоизученными. На кинетику МС в разбавленных системах Cu-Fe существенное влияние оказывают примеси. Одним из наиболее простых и эффективных способов исследования влияния примесей кислорода и углерода является использование мёссбауэровской спектроскопии с введением изотопа  $^{57}\text{Fe}$ . Источником примеси служит среда измельчения (жидкие углеводороды, вода), которые используются для предотвращения налипания меди на поверхности измельчающих тел и стенки контейнеров.

В данной работе методами мёссбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции исследована кинетика МС в системе Cu + 2 ат. %  $^{57}\text{Fe}$  в гептане и дистиллированной воде, а также структурно-фазовое состояние образцов после отжига при 600 и 700 °C. Начальные стадии МС связаны с переходом компонентов в наноструктурное состояние и накоплением продуктов деструкции среды на поверхности частиц. Последующие стадии МС зависят от среды измельчения. При МС в гептане первоначально вблизи межзеренных границ образуются группировки из 2–3 атомов железа, на более поздних стадиях процесса происходит проникновение железа в виде изолированных атомов от границ нанозёрен меди в более глубокие приграничные зоны. Формирование высокодисперсных включений карбидов и оксидов происходит только в процессе термообработки и, в первую очередь, за счет атомов железа, находящихся в группировках. При МС в воде происходит окисление поверхности частиц и формирование  $\text{Cu}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ , затем распад тройного оксида и образование высокодисперсного  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Твёрдый раствор железа в меди также образуется.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России, № гос. регистрации 01201157504, частично поддержана Программой Президиума УрО РАН, проект № 15-17-12-26.

## Безокислительная термообработка металлов в воздушной среде

Пилягин М.В., Вахитов И.Р., Дулов Е.Н., Тагиров Л.Р.

Казанский федеральный университет, Казань (Россия)

ltagirov@mail.ru

### Nonoxidation annealing of metals in an air atmosphere

Pilyagin M.V., Vakhitov I.R., Dulov E.N., Tagirov L.R.

We report on unconventional results on metal oxides reduction when heated up to 1000 °C in ambient atmosphere inside an open metallic muffle. The reduction process was studied giving evidence of electrochemical reaction where air plays a role of gaseous electrolyte.

Нагревание металлов в атмосфере, содержащей кислород, приводит к их окислению. В частности, при нагревании железа до температур 800–1000 °C в воздухе, на его поверхности образуется окисная пленка толщиной 120–520 мкм за 1 час. Мы представляем результаты экспериментов по восстановлению окисной пленки при термической обработке в открытом на воздух металлическом муфеле. Исследована кинетика процесса, стехиометрия и толщина ультратонкой окисной пленки восстановленных образцов методами мёсбауэровской спектроскопии конверсионных электронов (CEMS, глубина зондирования – 200 нм), сканирующей электронной микроскопии (SEM) и спектроскопии рентгеновских фотоэлектронов (XPS, глубина зондирования 3 нм). Наши результаты свидетельствуют об электрохимической природе наблюдаемого явления, в котором воздух играет роль газообразного электролита.

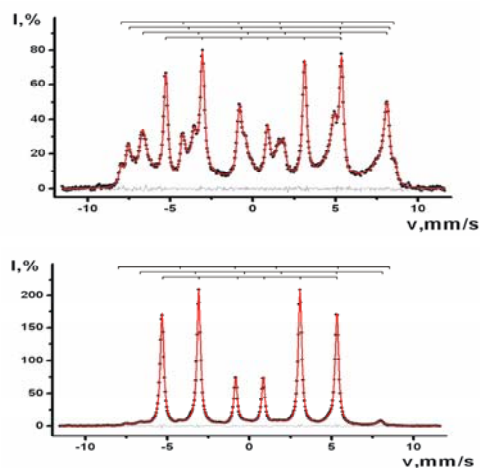


Рис. 1. CEMS спектры поверхности железа после окисления (вверху, смесь окислов) и после процедуры восстановления на воздухе (внизу, металлическое железо и следы магнетита)

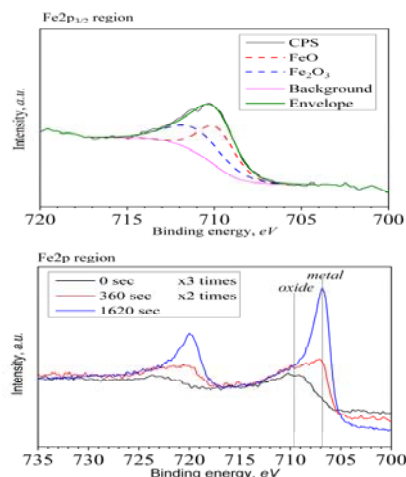


Рис. 2. XPS спектры поверхности восстановленного на воздухе железа (вверху, окислы) и эволюция XPS спектра при травлении поверхности пучком аргона (внизу, от окисла к металлическому Fe)

## О некоторых свойствах комплексных цианидов железа

Дедушенко С.К.<sup>1</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Лялин пер. 24/26-43, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

dedushenko@mail.ru

### On some properties of iron complex cyanides

Dedushenko S.K., and Perfiliev Yu.D.

We have observed the self-dehydration of three iron complex cyanides which leads to changes in their Mössbauer parameters.

Комплексные цианиды железа были хорошо известны еще в XIX веке. Однако и в настоящее время имеются вопросы относительно их строения.

Комплексные цианиды железа широко используются в мёссбауэровской спектроскопии. Нитропруссид натрия,  $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , используется для калибровки шкалы скорости. Гексацианоферрат(II) калия,  $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (желтая кровяная соль), и гексацианоферрат натрия,  $\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ , используются в качестве стандартных поглотителей при проведении эмиссионных экспериментов. Очевидно, что для использования в данных целях мёссбауэровские параметры солей должны быть неизменны во времени.

При работе с  $\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$  мы наблюдали процесс быстрой потери кристаллизационной воды кристаллами соли. В процессе обезвоживания крупные желтые кристаллы соли превращаются в белый порошок. Дегидратация проходит количественно, что подтверждается гравиметрически. Сравнение мёссбауэровских спектров свежесажженной соли и полностью дегидратировавшего вещества показывает, что при дегидратации наблюдается уширение линии поглощения, а также ее смещение.

В случаях нитропруссиды натрия и желтой кровяной соли дегидратация идет значительно медленнее, однако, она также наблюдается. Уширение линий поглощения наблюдается отчетливо. Изменение изомерного сдвига, а также квадрупольного расщепления если и наблюдается, то требует исследования.

## Изучение низкопроцентных платиновых катализаторов изомеризации n-алканов на пилларированных железом МОНТМОРИЛЛОНИТАХ

Закарина Н.А.<sup>1</sup>, Бродский А.Р.<sup>1</sup>, Яскевич В.И.<sup>1</sup>, Комашко Л.В.<sup>1</sup>, Волкова Л.Д.<sup>1</sup>,  
Ким О.К.<sup>1</sup>, Манакова И.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В.Сокольского, Алматы (Казахстан)

<sup>2</sup>Институт ядерной физики, Алматы (Казахстан)

albrod@list.ru, i.manakova25@mail.ru

## Study of low grade platinum catalysts supported by montmorillonite pillarired with iron for n-alkane isomerization

Zakarina N.A., Brodskii A.R., Yaskevich V.I., Komashko L.V., Volkova L.D., Kim O.K.,  
Manakova I.A.

Mössbauer spectroscopy and transparent microscopy were used for study of 0.1 % and 0.35 % platinum catalysts supported by Na- and Ca-form of montmorillonite pillarired with iron and treated with acid. It was found that after isomerization the catalyst contains iron in different oxidative state. It is supposed that main role in isomerization of n-hexane into C<sub>6</sub> isomers plays the bimetallic active site consisting of Pt<sup>0</sup> and Fe<sup>3+</sup>.

Низкопроцентные Pt- катализаторы на основе пилларированных железом монтмориллонитов (ММ) в Na- и Ca-формах показали высокую активность в изомеризации n-гексана. Методом ТЕМ в 0.1 % Pt- катализаторах были обнаружены частицы Pt<sup>0</sup> ~ 40–50 Å, фазы Pt, Pt<sub>3</sub>Fe, α-Fe и оксидов железа. С ростом содержания Pt идёт агрегация мелких частиц, что особенно заметно для 0.35 % Pt/Fe(2.5)CaНММ.

Для изучения особенностей изомеризации была использована мёссбауэровская спектроскопия. Так, в 0.1 % Pt-катализаторах наряду с парамагнитным Fe<sup>3+</sup> присутствуют остаточные формы гидроксокомплексов железа. Их содержание 80 и 56 % для FeNaНММ и FeCaНММ, соответственно. У 0.35 % Pt-катализаторов эти формы отсутствуют.

Содержание Fe<sup>3+</sup> составляет 73 и 57 % для Na и Ca-форм пилларированных материалов. Контакты после опыта содержат Fe<sup>2+</sup>. Для 0.1 и 0.35 % Pt/Fe(2,5)NaНММ содержание Fe<sup>2+</sup> составляет – 20 и 27 %, для 0.1 и 0.35 % Pt/Fe(2.5)CaНММ – 38 и 43 %, соответственно. У 0.1 % Pt/Fe(2.5)CaНММ – контакта зафиксировано, кроме того, образование α-Fe.

Можно полагать, что катализатором процесса восстановления при предобработке (500 °С) и в изомеризации n-гексана в H<sub>2</sub> (400 °С) является Pt. Рост содержания Pt ведет к активизации процесса восстановления железа. Минимальная конверсия n-гексана – 19.8 % отмечена для 0.1 % Pt/Fe(2.5)CaНММ, на котором кроме Fe<sup>2+</sup> присутствует Fe<sup>0</sup>. Высказано предположение, что за процесс изомеризации n-гексана в C<sub>6</sub>-изомеры отвечает биметаллический центр, включающий Pt<sup>0</sup> и Fe<sup>3+</sup>.

## Исследование комплекса железа(III) с индолил-3-масляной кислотой методами мёссбауэровской и ИК-спектроскопии

Камнев А.А., Тугарова А.В.

*ФГБУН Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов Российской академии наук, Саратов (Россия)*

aakamnev@ibppm.ru; a.a.kamnev@mail.ru

## Mössbauer and infrared spectroscopic study of iron(III) complex with indole-3-butyric acid

Kamnev A.A., Tugarova A.V.

Coordination of iron(III) with indole-3-butyric acid (an auxin phytohormone which can also be produced by soil microorganisms) was studied by Mössbauer and FTIR spectroscopic techniques.

Изучение комплексообразования низкомолекулярных органических соединений, нередко обладающих биологической активностью (внеклеточные сигнальные молекулы, ауксины и т.д.), с различными переходными металлами актуально вследствие экологического значения данных взаимодействий в почвах и водоносных слоях [1–3]. В настоящей работе с помощью методов мёссбауэровской и ИК фурье-спектроскопии показано, что индолил-3-масляная кислота (ИМК; фитогормон ряда ауксинов, продуцируемый также некоторыми почвенными микроорганизмами) образует с железом(III) димерный комплекс состава  $L_2Fe<(OH)_2>FeL_2$  (где  $L$  – анион депротонированной ИМК), в котором атомы железа соединены двумя  $\mu$ -дигидроксомостиковыми связями, с участием депротонированных карбоксильных групп ИМК в координации как бидентатных лигандов, в отличие от комплекса  $Fe^{III}$  с индолил-3-уксусной кислотой (ИУК) состава  $FeX_3$  (где  $X$  – анион депротонированной ИУК) [3].

### ЛИТЕРАТУРА

1. Kamnev A.A. Redox interactions between structurally different alkylresorcinols and iron(III) in aqueous media: frozen-solution  $^{57}Fe$  Mössbauer spectroscopic studies, redox kinetics and quantum chemical evaluation of the alkylresorcinol reactivities / A.A. Kamnev, R.L. Dykman, K. Kovács, A.N. Pankratov, A.V. Tugarova, Z. Homonnay, E. Kuzmann // Struct. Chem. – 2014. – V. 25, N 2. – P. 649–657.
2. Kamnev A.A. Cobalt(II) complexation with small biomolecules as studied by  $^{57}Co$  emission Mössbauer spectroscopy / A.A. Kamnev, Yu.D. Perfiliev, L.A. Kulikov, A.V. Tugarova, K. Kovács, Z. Homonnay, E. Kuzmann // Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. – 2016. – DOI: 10.1016/j.saa.2016.04.031.
3. Kamnev A.A. Spectroscopic investigation of indole-3-acetic acid interaction with iron(III) / A.A. Kamnev, A.G. Shchelochkov, Yu.D. Perfiliev, P.A. Tarantilis, M.G. Polissiou // J. Mol. Struct. – 2001. – V. 563–564. – P. 565–572.

## Локальное окружение зондовых ионов $^{119}\text{Sn}^{4+}$ в объеме и на поверхности ортохромита иттрия при гетеровалентных замещениях

**Межуев Е.М.<sup>1</sup>, Афанасов М.И.<sup>1</sup>, Ваттио А.<sup>2</sup>, Фабричный П.Б.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

<sup>2</sup>*Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux, Pessac Cedex (France)*

mezhuevdzeko@gmail.com

### Local surrounding of $^{119}\text{Sn}^{4+}$ probe ions in the bulk and on the surface of yttrium orthochromite upon heterovalent substitutions

Mezhuev E.M., Afanasov M.I., Wattiaux A., Fabritchnyi P.B.

$^{119}\text{Sn}$  Mössbauer spectra of an  $\text{Y}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Cr}_{0.897}\text{Mg}_{0.1}\text{Sn}_{0.003}\text{O}_3$  sample, containing  $\text{Sn}^{4+}$  in the bulk of crystallites, have provided the original indirect evidence for the statistical distribution of  $\text{Cr}^{3+}$  and  $\text{Mg}^{2+}$  ions over the octahedral sites and permitted characterization of the occurring associates of  $\text{Sn}^{4+}$ . Neither highly oxidized  $\text{Cr}^{4+}$  nor  $\text{Cr}^{6+}$  species, expected to compensate for the  $\text{M}^{2+}$  (Ca, Mg) positive charge deficit, is found in the vicinity of the  $^{119}\text{Sn}^{4+}$  probe. A drastic weakening in spin polarization is observed for the  $\text{Sn}^{4+}$  ions on surface sites.

Установление реальных механизмов зарядовой компенсации при гетеровалентных замещениях в объеме частиц и выяснение их влияния на состав поверхности остаются актуальной проблемой. Селективная локализация зондовых ионов олова как в объеме, так и на поверхности кристаллитов  $\text{Y}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Cr}_{0.897}\text{Mg}_{0.1}\text{Sn}_{0.003}\text{O}_{3-\delta}$  позволила применить зондовую мёссбауэровскую спектроскопию  $^{119}\text{Sn}$  для диагностики процессов, протекающих в соответствующих областях вещества.

Анализ СТС мёссбауэровских спектров образцов  $\text{Y}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Cr}_{0.897}\text{Mg}_{0.1}\text{Sn}_{0.003}\text{O}_3$  выявил существование у ионов  $\text{Sn}^{4+}$  двух основных магнитно-неэквивалентных типов окружения. В позициях первого типа ионы  $\text{Sn}^{4+}$  окружены шестью катионами  $\text{Cr}^{3+}$ , создающими на ядрах олова сверхтонкое поле  $H_{4,2\text{K}} = 81$  кЭ; для позиций второго типа  $H_{4,2\text{K}} = 67$  кЭ, что соответствует обрыву одной из магнитных связей  $\text{Sn}^{4+}$ . Сравнение мёссбауэровских спектров образцов, полученных до и после дополнительного отжига в  $\text{H}_2$ , с привлечением модели статистического распределения ионов магния и хрома в октаэдрической подрешетке, и данных РФЭС показало, что секстет с  $H_{4,2\text{K}} = 67$  кЭ связан с заменой в окружении  $\text{Sn}^{4+}$  одного иона  $\text{Cr}^{3+}$  на  $\text{Mg}^{2+}$  или с образованием ассоциатов  $\{(\text{Cr}^{3+}-\text{O})_5-\text{Sn}^{4+}-\text{O}-\text{Sn}^{4+}-(\text{O}-\text{Cr}^{3+})_5\}$ .

Отжиг прекурсора, полученного цитратным золь-гель методом, в атмосфере  $\text{H}_2$  приводит к стабилизации  $^{119}\text{Sn}^{2+}$  на поверхности кристаллитов  $\text{Y}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Cr}_{0.897}\text{Mg}_{0.1}\text{Sn}_{0.003}\text{O}_{3-\delta}$ . В докладе рассмотрены сверхтонкие взаимодействия  $^{119}\text{Sn}^{2+}$  и  $^{119}\text{Sn}^{4+}$  в тонких поверхностных слоях с привлечением данных об их атомном составе, полученных методом РФЭС.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 16-33-00501).

## **Мёссбауровские исследования продуктов термokatалитического воздействия на керогенсодержащую породу**

**Иванова А.Г.<sup>1</sup>, Вахин А.В.<sup>2</sup>, Воронина Е.В.<sup>1</sup>, Пятаев А.В.<sup>1</sup>, Нургалиев Д.К.<sup>2</sup>,  
Онищенко Я.В.<sup>2</sup>**

*Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань (Россия)  
Институт геологии и нефтегазовых технологий, Казанский федеральный университет,  
Казань (Россия)  
evoronina2005@yandex.ru*

## **Mössbauer study of products of the the thermocatalytic exposure to kerogen-containing rocks**

**Ivanova A.G., Vakhin A.V., Voronina E.V., Pyataev A.V., Nurgaliev D.K.,  
Onishchenko Y.V.**

In-situ treatment of the kerogen-containing rocks is aimed at the production of synthetic oil. One way of stimulation of in-situ transformations of the kerogen - use of nanoscale metal catalysts based on transition metals. The results of the Mössbauer study of the original kerogen samples and after thermocatalytic exposure show a significant change in the phase composition. It is found that cracking catalysts based on cobalt along with influence on organic substances promote the transformation of the pyrite into mixed iron oxides, which are also hydrocracking catalysts.

Обработка внутрипластовых кероген-содержащих пород нацелена на продуцирование синтетической нефти. Один из способов интенсификации внутрипластовых преобразований керогена – применение наноразмерных металлических катализаторов на основе переходных металлов. Исследованные образцы представляли собой кероген-содержащую породу баженовской формации до и после термokatалитического воздействия. Лабораторное моделирование такого воздействия на образец проводилось в автоклаве. Использовался катализатор на основе кобальта.

Результаты мёссбауровских исследований образцов исходного керогена и после термokatалитического воздействия свидетельствуют о значительном изменении фазового состава. Спектр пропускания образца исходного керогена соответствует мономинеральному пириту. В спектре образца, подвергнутого термической обработке, парциальная площадь пирита составляет  $\approx 51\%$ . Другие компоненты спектра, демонстрирующие сверхтонкую магнитную структуру, соответствуют неэквивалентным позициям атомов железа в структуре шпинели типа  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (суммарной парциальной площадью  $\approx 6\%$ ) и пирротина (суммарной площадью  $\approx 43\%$ ). Обнаружено, что катализаторы крекинга на основе кобальта наряду с воздействием на органическое вещества породы способствуют преобразованию пирита в смешанные оксиды железа, которые, в свою очередь, также являются катализаторами гидрокрекинга.

*Topic VI*

*Synchrotron radiation and gamma optics*



## Mössbauer reflectivity investigations of $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$ multilayers using Synchrotron Mössbauer Source

**Andreeva M.A.<sup>1</sup>, Baulin R.A.<sup>1</sup>, Chumakov A.I.<sup>2,3</sup>, Smirnov G.V.<sup>2</sup>, Rüffer R.<sup>3</sup>, Babanov Yu.A.<sup>4</sup>, Devyaterikov D.I.<sup>4</sup>, Goloborodsky B.Yu.<sup>4</sup>, Ponomarev D.A.<sup>4</sup>, Romashev L.N.<sup>4</sup>, Ustinov V.V.<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*

<sup>2</sup>*National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow (Russia)*

<sup>3</sup>*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France)*

<sup>4</sup>*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics RAS, Ekaterinburg (Russia)*

Mandreeva1@yandex.ru

Mössbauer reflectivity is the very advanced method for investigations of the magnetic ordering in magnetic multilayers (see e.g. [1]). 4 multilayers, prepared at IPM RAS:  $[\text{}^{57}\text{Fe}(1.2 \text{ \AA})/\text{Cr}(10.5 \text{ \AA})]_{30}$  (A1),  $[\text{}^{57}\text{Fe}(2.1 \text{ \AA})/\text{Cr}(10.5 \text{ \AA})]_{30}$  (A2),  $[\text{}^{57}\text{Fe}(8 \text{ \AA})/\text{Cr}(10.5 \text{ \AA})]_{30}$  (A3),  $[\text{}^{57}\text{Fe}(8 \text{ \AA})/\text{Cr}(20 \text{ \AA})]_{30}$  (F2) – were investigated at the Nuclear Resonance beamline (ID18) of the ESRF in a wide range of low temperatures and applied magnetic fields.

The A1 and A2 samples (having the thinnest  $^{57}\text{Fe}$  layers) did not show any periodicity (no Bragg maxima in the reflectivity curve). Mössbauer spectra of reflectivity for these samples have been measured near the critical angle of the total reflection. The nuclear reflectivity curve for the samples A3 and F2 showed the  $\frac{1}{2}$ -order “magnetic” Bragg peaks confirming the doubling of the magnetic period (initially F2 was supposed to have ferromagnetic interlayer ordering).

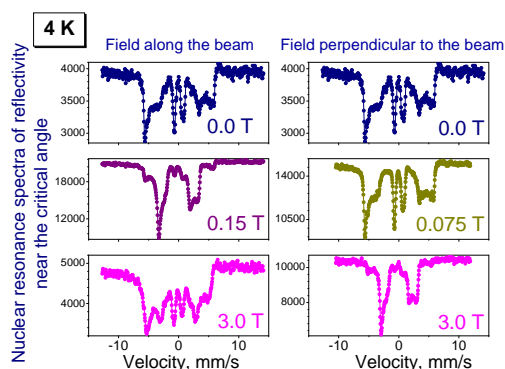


Fig. 1. Mössbauer reflectivity spectra for A3 sample near the critical angle

Synchrotron Mössbauer Source has  $\pi$ -polarization, so for hyperfine fields ( $B_{\text{hf}}$ ) aligned perpendicular to the reflection plane just 2<sup>nd</sup> and 5<sup>th</sup> lines should be presented in Mössbauer reflectivity spectra but for  $B_{\text{hf}}$  directed along synchrotron beam we can see only 1<sup>st</sup>, 3<sup>rd</sup>, 4<sup>th</sup> and 6<sup>th</sup> lines. The example of the  $B_{\text{hf}}^{(i)}$  reorientations under the applied field  $H_{\text{ext}}$  is presented in Fig. 1. Spectra confirm that at weak  $H_{\text{ext}}$ ,  $B_{\text{hf}}^{(i)}$  in antiferromagnetically coupled  $^{57}\text{Fe}$  layers get almost perpendicular orientation to  $H_{\text{ext}}$ . At higher  $H_{\text{ext}}$  the ferromagnetic alignment appears.

The joint fit of the nuclear resonance reflectivity curves and Mössbauer spectra measured at the critical angle and at the “magnetic” maximum reveals details of the reorientation of the magnetization in separate layers under the applied field in the investigated samples.

The work is supported by RFBR (No.15-02-01674-a and 15-02-01502-a).

### REFERENCES

Andreeva, M. Field induced spin reorientation in  $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$  multilayers studied by nuclear resonance reflectivity / M. Andreeva et al. // Phys. Rev. B. – 2015. – V.92. – P. 134403-1-12.

## Новые приложения эффекта мёссбауэра

**Вагизов Ф.Г.<sup>1</sup>, Шахмуратов Р.Н.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань (Россия)

<sup>2</sup>Казанский физико-технический институт КНЦ РАН, Казань (Россия)

vagizovf@gmail.com

### New applications of the Mössbauer effect

Vagizov F.G., Shakhmuratov R.N.

The propagation of a single-photon wave packet in a resonant absorber undergoing piston-like vibrations or rapid displacement at a certain instant after the beginning of a wave packet emission is investigated experimentally. The possible applications of the observed effects are considered.

В последнее время эффекты квантовой интерференции привлекают повышенное внимание исследователей в связи с широким спектром возможных применений в квантовой оптике. Рекордно высокая монохроматичность и резонансный характер взаимодействия мёссбауэровского излучения, сравнительно большое время жизни типичных мёссбауэровских изотопов позволяют расширить эти приложения и в более коротковолновую область.

В данной работе приводятся результаты экспериментальных исследований некоторых эффектов квантовой интерференции, которые могут найти практическое применение. В частности, на основе экспериментальных данных будет показана возможность использования эффекта Мёссбауэра для изучения опто-акустических явлений [1], возможность улучшения разрешения при определении сдвига резонансной линии за счет интерференционных эффектов, возможность управления групповой скоростью мёссбауэровского фотона с помощью оптически плотных сред, имеющих дублетную структуру линий поглощения, возможность переключения деструктивной интерференции на конструктивную и, наоборот, путем смещений резонансных ядер в определенные моменты времени формирования волнового пакета. Будут приведены результаты экспериментов по наблюдению/созданию time-bin qubits размерности  $d$  ( $d = 2, 3, \dots$ ) на однофотонных состояниях излучения, структурированные во времени разбиением на временные страты (time bins), которые содержат излучение или нет [2, 3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 15-02-09039а.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Vagizov F.* Application of the Mössbauer effect to the study of opto-acoustic phenomena / F. Vagizov, R. Shakhmuratov, et al. // *Phys. Stat. Sol. B.* – 2015. – V.252. – P.469-475.
2. *Vagizov F.* Coherent control of the waveforms of recoilless  $\gamma$ -ray photons / F. Vagizov, V.A. Antonov, et al. // *Nature.* – 2014. – V.508. – P.80-83.
3. *Shakhmuratov R.* Transformation of a single-photon field into bunches of pulses / R. Shakhmuratov, F. Vagizov, et al. // *Phys. Rev. A.* – 2015. – V.92. – P. 023836-15.

## **Мёссбауэровское рассеяние вперед в поле звука: альтернативные схемы эксперимента**

**Садыков Э.К., Юричук А.А., Вагизов Ф.Г., Мубаракшин Ш.И.**

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань (Россия)*

Edgar.Sadykov@kpfu.ru

### **Mössbauer forward scattering under acoustical excitation: alternative schemes of experiment**

**Sadykov E.K., Yurichuk A.A., Vagizov F.G., Mubarakshin Sh.I.**

The Mössbauer response models of thick targets in external fields for various experimental schemes using the natural source are proposed.

Моделируется мёссбауэровский отклик толстой мишени, возбужденной звуком, включая: а) спектры рассеяния вперед (РВ), б) спектры, измеряемые в схеме поглощения, а также в) временные спектры в схеме запаздывающих совпадений. Эффекты толстой мишени в этих спектрах обусловлены когерентным усилением рамановского мёссбауэровского рассеяния вперед [1]. Последнее зависит от степени когерентности (корреляции фаз) звуковых колебаний ядер в мишени и максимально выражено для синфазных колебаний. В этом случае спектр РВ содержит сателлиты [1], однофотонный временной спектр претерпевает расщепление [2], а спектр поглощения содержит информации о фазовой корреляции звуковых колебаний ядер в мишени [3]. Модели, предложенные для произвольной степени корреляции [2] и допускающие распределение амплитуд колебаний ядер в мишени, представляют инструмент обработки спектров в широком диапазоне условий эксперимента. Ряд мёссбауэровских экспериментов последнего времени, а также отдельные теоретические результаты [3] являются иллюстрацией востребованности обсуждаемых моделей. В целом, модели формирования традиционных мёссбауэровских спектров (на естественном источнике) оказываются приближенными к моделям мёссбауэровского отклика на импульсы синхротронного излучения. Работа поддержана РФФИ (Проект № 14-02-01078а).

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. *Shvyd'ko Yu. V.* Enhanced yield into the radiative channel in Raman nuclear resonant forward scattering / Yu. V. Shvyd'ko, G. V. Smirnov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1992. – V. 4. – №. 10. – P. 2663.
2. *Садыков Э.К.* Мессбауэровское рассеяние вперед: однофотонный отклик толстых поглотителей в переменном поле / Э.К. Садыков, А.А. Юричук, Ф.Г. Вагизов // *Письма в ЖЭТФ*. – 2015. - Т. 102. – С. 139.
3. *Садыков Э.К.* Эффект толщины в случае мессбауэровских образцов в переменном поле / Э.К. Садыков, А.А. Юричук // *Письма в ЖЭТФ*. – 2014. - Т. 99. – С. 195.

# High pressure study of langasites $\text{Ba}_3\text{MFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ ( $M = \text{Ta}$ and $\text{Nb}$ ) by XRD, Mössbauer and Raman spectroscopy

**Nikiforova Yu.A.<sup>1</sup>, Lyubutin I.S.<sup>1</sup>, Gavriiliuk A.G.<sup>1,2</sup>, Starchikov S.S.<sup>1</sup>, Sulyanov S.N.<sup>1</sup>, Ivanova A.G.<sup>1</sup>, Troyan I.A.<sup>1</sup>, Aksenov S.N.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow (Russia)

<sup>2</sup> Institute for Nuclear Research, RAS, Moscow (Russia)

juliadavudova@gmail.com

Langasite  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  gave the name to the big family of crystals, which have the unique piezoelectric properties in combination with luminescent, laser, and nonlinear optical properties. Recently, a strong interest was attracted to the langasite-type compounds containing magnetic ions [1, 2]. Coexistence of electric and magnetic order parameters in these materials provide a new type of multiferroics. In our study, the iron containing langasite compounds  $\text{Ba}_3\text{MFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  ( $M = \text{Nb}$ ,  $\text{Ta}$ ) have been prepared and investigated. The trigonal crystal structure of  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  is shown in Fig. 1. The studies of the magnetic and structural properties of  $\text{Ba}_3\text{MFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  were performed by Mössbauer and Raman spectroscopy and X-ray powder diffraction under high pressure up to 55 GPa created in the diamond anvil cells.

Two structure transitions induced by high hydrostatic pressures have been found and investigated by the synchrotron X-ray diffraction in DESY (Petra-III, Gamburg, Germany). The high-pressure Mössbauer and Raman spectroscopy data also reveal anomalies in magnetic and electronic properties of these compounds at about 5 and 20 GPa. It was established that the pressure-induced magnetic and structural transitions are very sensitive to the atomic composition of the langasite-type compounds.

This work is supported by the Russian Scientific Foundation (grant № 16-12-10464) and Russian Foundation for Basic Research (grant 14-02-00483a).

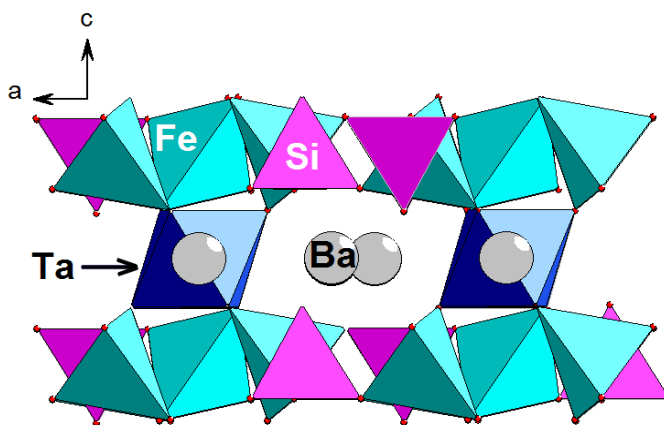


Fig. 1. The unit cell of the iron langasite (sp. gr.  $P321$ ,  $Z=1$ ). All  $\text{Fe}^{3+}$  ions are in the tetrahedral oxygen sites

## REFERENCES

1. Marty K. Single domain magnetic helicity and triangular chirality in structurally enantiopure  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  / K. Marty, et al. // Phys.Rev.Lett. –2008. – V. 101. –P 247201.
2. Lyubutin I.S. Equation of state and structural phase transitions in iron-based  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  langasite at high hydrostatic pressures / I.S. Lyubutin, A.G. Gavriilyuk, Yu.A. Davydova, et al. // JETP Lett. – 2014. – V. 100. – № 12 – P. 798–806.

## Мёссбауэровское рассеяние вперёд на $\text{FeBO}_3$ в режиме РЧ переключений поля на ядре

Садыков Э.К., Аринин В.В., Петров Г.И.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань (Россия)*

Edgar.Sadykov@kpfu.ru

### Mössbauer forward scattering on $\text{FeBO}_3$ in RF hyperfine field reversal regime

Sadykov E.K., Arinin V.V., Petrov G.I.

Mössbauer forward scattering spectra on iron borate under RF reversals of hyperfine field are measured. The mechanisms responsible for temperature dependence of spectra are proposed.

В данном сообщении мы обсуждаем результаты новых мёссбауэровских измерений по схеме рассеяния вперёд (РВ) на борате железа в режиме его радиочастотного (РЧ) перемагничивания [1] при температурах ниже  $T_N$ . Измерения показали, что с понижением температуры происходит достаточно быстрое уменьшение интенсивности сателлитов в спектрах РВ. Описание полученной температурной зависимости достигнуто на основе модификации модели, впервые использованной в [1]. Возможны два механизма, которые ведут к наблюдаемому эффекту. Вблизи температуры Нееля (снизу) магнитная система может быть представлена как совокупность магнитных кластеров, слабо связанных друг с другом. В этих условиях следует ожидать одновременного перемагничивания всех кластеров при определенных значениях фазы внешнего РЧ поля, вызывая когерентное усиление рамановского рассеяния гамма фотонов вперёд. Однако с понижением температуры растет межкластерное взаимодействие, что может привести сначала к расфазировке переключений намагниченности кластеров и, далее, к срыву переключений поля на отдельных кластерах. Оба процесса уменьшают эффект рамановского рассеяния мёссбауэровских фотонов, уменьшая, в конечном счёте, интенсивность сателлитов. Описанные процессы способны объяснить обнаруженную температурную зависимость спектров РВ, по крайней мере, на начальной стадии изменения температуры.

Работа поддержана РФФИ (Проект № 14-02-01078а).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Садыков Э.К. Мессбауэровское рассеяние вперед на  $\text{FeBO}_3$  в режиме РЧ перемагничивания / Э.К. Садыков, А.Я. Дзюблик, Г.И. Петров, В.В. Аринин // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – Т. 92. – С. 279.

## Эффект толщины в мёссбауэровской спектроскопии в режиме влияния внешних полей: законы сохранения

Садыков Э.К., Юричук А.А., Аринин В.В.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань (Россия)*

Edgar.Sadykov@kpfu.ru

### The thickness effect in Mössbauer spectroscopy in external field influence regime: exact results

Sadykov E.K., Yurichuk A.A., Arinin V.V.

The new possibilities of Mössbauer experiments with thick samples in external fields are analyzed. The confirmation of matter by analytical and model calculations is presented.

Мёссбауэровские эксперименты на протяженных образцах отличаются большим разнообразием формирования мёссбауэровского отклика и благодаря этому несут дополнительную информацию. Примером служит чисто ядерно-резонансная дифракция мёссбауэровского излучения. Другим эффектом толщины является формирование частотной или временной структуры в спектре рассеяния вперед (РВ) на мишени, подверженной влиянию внешнего переменного поля [1]. Оба эффекта – следствие когерентного усиления мёссбауэровского отклика благодаря конструктивной интерференции амплитуд рассеяния. В таких экспериментах [1] результат (например, степень когерентного усиления) зависит от степени фазовой корреляции процессов, индуцируемых внешним полем. В этом сообщении рассмотрены модифицированные модели мёссбауэровского отклика (включая спектр поглощения, измеряемый по традиционной схеме), учитывающие возможную пространственную корреляцию динамических процессов в толстых мишенях. Обсуждаются также характерное поведение эффекта толщины для толстых мёссбауэровских поглотителей во внешних полях. Например, обращено внимание на взаимосвязь между интегральным поглощением толстого поглотителя и характером колебаний ядер в образце [2]. Показано постоянство интегрального поглощения в случае синфазных звуковых колебаний (аналитически) и в случае синфазных РЧ переключений сверхтонкого поля по направлению (численно) [3]. Работа частично поддержана РФФИ (№ 14.02.01078 а).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Shvyd'ko Yu.V.* Enhanced yield into the radiative channel in Raman nuclear resonant forward scattering / Yu.V. Shvyd'ko, G.V. Smirnov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1992. – V. 4. – №. 10. – P. 2663.
2. *Садыков Э.К.* Эффект толщины в случае мёссбауэровских образцов в переменном поле / Э.К. Садыков, А.А. Юричук // *Письма в ЖЭТФ*. – 2014. – Т. 99 – С. 195.
3. *Садыков Э.К.* Мёссбауэровское рассеяние вперед на FeVO<sub>3</sub> в режиме РЧ перемагничивания / Э.К. Садыков, et al. // *Письма в ЖЭТФ*. – 2010. – Т. 92. – С. 279.

*Topic VII*

*Mineralogy geosciences, ecology and a cultural heritage*

## Биогенные преобразования железосодержащих минералов в щелочных условиях

**Чистякова Н.И.<sup>1</sup>, Шапкин А.А.<sup>1</sup>, Антонова А.В.<sup>1</sup>, Медвецкая И.Ю.<sup>1</sup>, Пчелина Д.И.<sup>1</sup>,  
Грачева М.А.<sup>1</sup>, Киселева Т.Ю.<sup>1</sup>, Жилина Т.Н.<sup>2</sup>, Гаврилов С.Н.<sup>2</sup>, Заварзина Д.Г.<sup>2</sup>,  
Русаков В.С.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт Микробиологии им. С.Н. Виноградского РАН, Москва (Россия)

nchistyakova@yandex.ru

### Biogenic transformation of iron-containing minerals in alkaline conditions

Chistyakova N.I., Shapkin A.A., Antonova A.V., Medvetskaya I.Yu., Pchelina D.I.,  
Gracheva M.A., Kiseleva T.Yu., Zavarzina D.G., Zhilina T.N., Gavrilov S.N., Rusakov V.S.

Biogenic transformation of iron-containing minerals such as synthesized ferrihydrite, magnetite, biotite and glauconite, iron sulfide by different alkalophilic bacteria were investigated. It was found the formation of hematite in the case of *F. ferrireducens*. In the case of the binary culture *C. alkalicellulosi* and *G. ferrihydriticus* on biotite and glauconite the formation of magnetically ordered phase was caused by the oxidation of divalent atoms. The change in the number of cells per one particle lead to a change in the size of the particles formed and the ratio between biogenic magnetite and siderite.

В настоящей работе методами мёссбауэровской спектроскопии были исследованы биогенные преобразования железосодержащих минералов, таких как синтезированный ферригидрит, магнетит, филлосиликаты биотит и глауконит, сульфид железа. Преобразования минералов осуществлялись алкалофильными бактериями *G. ferrihydriticus*, *F. ferrireducens*, *C. thermotrophicus*, бинарной культурой *C. alkalicellulosi* и *G. ferrihydriticus*.

При росте бактерий на синтезированном ферригидрите процесс восстановления приводил к образованию сидерита и магнитоупорядоченной фазы (МУФ), которая, как правило, являлась смесью магнетита и маггемита. В случае *F. ferrireducens* было обнаружено образование гематита. Наблюдалось образование наночастиц МУФ.

В случае роста бинарной культуры *C. alkalicellulosi* и *G. ferrihydriticus* на биотите и глауконите было установлено, что образование МУФ вызвано не восстановлением трёхвалентных атомов железа, что обычно наблюдалось в экспериментах, а окислением двухвалентных атомов.

Были проведены исследования влияния количества бактерий, приходящихся на частицу ферригидрита на процесс железоредукции при росте *G. ferrihydriticus* на ферригидрите. Установлено, что изменение количества клеток, приходящихся на одну частицу, приводит к изменению размера формирующихся частиц, а также изменяет соотношение между содержанием биогенно синтезированных сидерита и магнетита.



# The Fe<sup>2+</sup> occupancies in the silicates M1 and M2 sites in Chelyabinsk LL5 meteorite determined using XRD and Mössbauer spectroscopy

**Maksimova A.A., Chukin A.V., Semionkin V.A., Oshtrakh M.I.**

*Institute of Physics and Technology, Ural Federal University,  
Ekaterinburg (Russian Federation)  
alia55@bk.ru*

Ordinary chondrites are stony meteorites which consist of various iron-bearing phases such as silicates, troilite, Fe-Ni-Co alloy, chromite and some other phases. Silicates (olivine (Fe, Mg)<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>, orthopyroxene (Fe, Mg)SiO<sub>3</sub> and clinopyroxene (Fe, Mg, Ca)SiO<sub>3</sub>) have two crystallographically non-equivalent positions for Fe<sup>2+</sup> and Mg<sup>2+</sup> cations denoted as M1 and M2. The knowledge of the Fe<sup>2+</sup> and Mg<sup>2+</sup> partitioning between the M1 and M2 sites in silicate phases is important for estimation of silicates thermal history. Therefore, evaluation of the Fe<sup>2+</sup> and Mg<sup>2+</sup> partitioning in silicate phases in ordinary chondrites could be used for analysis of their thermal history. We consider the results of the study of four Chelyabinsk LL5 meteorite fragments (No 1, No 1a, No 2, No 3) using X-ray diffraction (XRD) and Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution to evaluate the M1 and M2 sites occupations by Fe<sup>2+</sup>. Components related to the M1 and M2 sites in olivine, orthopyroxene and clinopyroxene were revealed in the Mössbauer spectra of Chelyabinsk LL5 fragments (see Fig.1). The Fe<sup>2+</sup> occupations of the M1 and M2 sites in silicate phases ( $X_{\text{Fe}}^{\text{M1}}$  and  $X_{\text{Fe}}^{\text{M2}}$ , respectively) were determined from XRD patterns of Chelyabinsk LL5 fragments. Similar evaluation of  $X_{\text{Fe}}^{\text{M1}}$  and  $X_{\text{Fe}}^{\text{M2}}$  was done using corresponding relative areas of the Mössbauer spectra components. A comparison of  $X_{\text{Fe}}^{\text{M1}}$  and  $X_{\text{Fe}}^{\text{M2}}$  values obtained using XRD and Mössbauer spectroscopy appeared to be similar or of the same order. For instance,  $X_{\text{Fe}}^{\text{M1}}/X_{\text{Fe}}^{\text{M2}}$  values for olivine were 1.17 (XRD) and 1.18 (MS), for orthopyroxene were 0.20 (XRD) and 0.25 (MS) and for clinopyroxene were 1.78 (XRD) and 1.90 (MS) in fragment No 2.

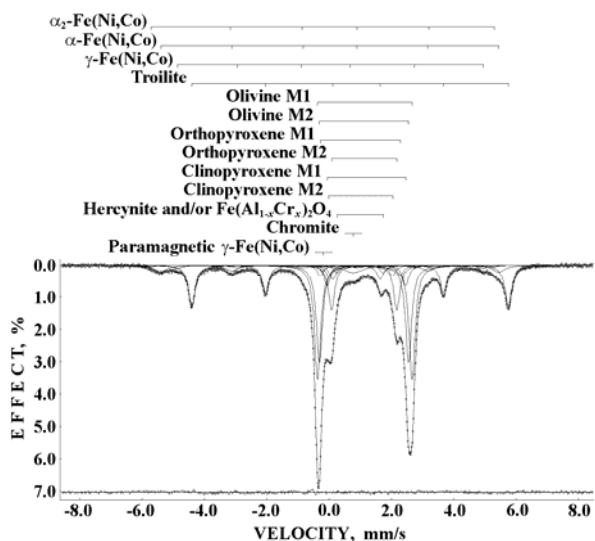


Fig. 1. Mössbauer spectrum of Chelyabinsk LL5 fragment No 2. T=295 K

The results obtained demonstrated that ordinary chondrites thermal history could be evaluated using XRD and Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution.

Contribution to the study was funded by the RFBR according to the research Project No. 16-32-00151 mol\_a. This work was supported in part by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project No. 2085).

## Мёссбауэровские исследования состояния железа в алюмосиликатном реагенте для очистки воды

Феклистов Д.Ю.<sup>1</sup>, Филиппов В.П.<sup>1</sup>, Курчатов И.М.<sup>1</sup>, Лагунцов Н.И.<sup>1</sup>, Саломасов В.А.<sup>1</sup>,  
Пермяков Ю.В.<sup>2</sup>, Оштрах М.И.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва (Россия)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и  
радиотехнических измерений, Зеленоград (Россия)

<sup>3</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург (Россия)

vpfilippov@mephi.ru

## Mössbauer investigation of iron state in alumino-silicate reagent for water treatment

Feklistov D.Yu, Filippov V.P., Kurchatov I.M., Laguntsov N.I, Salomasov V.A.,  
Permyakov Yu.V., Oshtrakh M.I.

The iron state in the new-made alumino-silicic reagent for the contaminated water treatment before and after reaction with water is investigated. It was revealed that iron is in trivalent and divalent states. The spectra parameters of reagent and products are different. Existence of superparamagnetic particles is shown.

В новом наноструктурированном алюмосиликатном реагенте [1] изучалось состояние железа до и после взаимодействия с загрязнённой железом водой. Новый сорбент на базе известного коагулянта-флокулянта АКФК синтезирован из нефелина в смеси с концентрированной серной кислотой. Определено состояние железа в исходном реагенте, в котором оно находится в двух и трёхвалентном состояниях, причем основная доля (~ 90 %) железа находится в трёхвалентном состоянии. В продуктах реакции обнаружено железо, которое находится так же в двух и трёхвалентном состояниях, но параметры спектров железа в осадках значительно отличаются от таковых в реагенте, например, значительно (примерно в два раза) возрастает значение квадрупольного расщепления в спектре для двухвалентного состояния. Температурные исследования показали, что определенная доля железа в осадке находится в виде суперпарамагнитных наночастиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобороны РФ, соглашение № 14.575.21.0086, индивидуальный идентификатор проекта RFMEFI57514X0086.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Kurchatov I.M.* The reagent-sorption technology of water treatment / I.M. Kurchatov, N.I. Laguntsov, Y.P. Neschimenko, D.Y. Feklistov // Phys. Proc. – 2015. – V. 72. – P. 89-92.

## Application of X-ray computed tomography, NQR and Mössbauer in studies of fossil wood

**Gainov R.R.**<sup>1,2</sup>, **Khassanov R.R.**<sup>2</sup>, **Vagizov F.G.**<sup>2</sup>, **Golovanevskiy V.A.**<sup>3</sup>, **Pen'kov I.N.**<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

<sup>2</sup>*Curtin University of Technology, Kent St., Bentley, Perth (Australia)*

*g\_ramil@mail.ru*

The samples under the study represent the fossil wood from the sediments of the Sarmanovskii ore-formation (Permian deposits of the Volga-Ural region) in their original local geochemical environment. The combined application of X-ray micro-tomography, nuclear quadrupole resonance (NQR) and Mössbauer techniques allows to evaluate the evolution of the geological processes in these sediments [1, 2].

X-ray computed tomographic 3D images of the fossil wood demonstrate presence of a zonal structure characterized by an inhomogeneous mineral composition. The wood cells were found to be filled by copper and minor iron minerals as shown by the NQR and Mössbauer studies. More detailed studies show that there are original copper sulfides of the non-stoichiometric family  $\text{Cu}_{2-x}\text{S}$ , ( $0 < x < 1$ ), which have been sealed inside the external "envelop" from CuS and other compounds, and, as the consequence, preserved in the close to the original ultra-dispersed state at the central part of the clusters. These non-stoichiometric  $\text{Cu}_{2-x}\text{S}$  compounds reflect the initial geological processes of the ore-formation due to their bacterial sulfate-reduction nature in the early diagenesis stage. Based on the studies made, it appears feasible to consider the original binary Cu sulfides as mineral-indicators which show the evolution of geological processes in sediments.

The results of studies are presented and discussed.

The work is performed according to the Russian Government Program of Competitive Growth of Kazan Federal University.

### REFERENCES

1. *Khassanov R.R.* Substitution of plant residues for copper sulfides in Permian deposits of Viatka-Kamian copper-bearing zone / R.R. Khassanov, R.R. Gainov, E.S. Varlamova, A.F. Islamov // *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Estestvennye Nauki.* – 2009. – V.151. – No.4. – P. 162-169 (in Russian with English title and abstract).
2. *Khassanov R.R.* Mineralization of fossil wood, as revealed using X-ray computed tomography, NQR and Mössbauer spectroscopy / R.R. Khassanov, R.R. Gainov, O.P. Shilovskiy, R.I. Khamadiev, V.A. Golovanevskiy, F.G. Vagizov // Submitted to *J. Phys. Chem. C*.

## Исследования процессов бактериального восстановления атомов железа в структуре магнетита

Антонова А.В.<sup>1</sup>, Чистякова Н.И.<sup>1</sup>, Шапкин А.А.<sup>1</sup>, Родионов И.Д.<sup>1</sup>,  
Жилина Т.Н.<sup>2</sup>, Заварзина Д.Г.<sup>2</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт Микробиологии им. С.Н. Виноградского РАН, Москва (Россия)

angelina.antonova@gmail.com

### Studies of bacterial iron reduction process in magnetite structure

Antonova A.V., Chistyakova N.I., Shapkin A.A., Rodionov I.D.,  
Zhilina T.N., Zavarzina D.G., Rusakov V.S.

*G. ferrihydriticus* (strain Z-0531) is a dissimilatory iron-reducing bacterium that can get energy through reductive transformations of ferric iron in different compounds. During processes of bacterial iron reduction in the presence of synthesized magnetite, natural magnetite in the cultivation medium the formation of new phases was observed.

Настоящая работа посвящена исследованиям бактериального восстановления атомов железа в структурах синтетического и природного магнетита при различных условиях.

Для проведения исследований был синтезирован магнетит, и затем добавлен в среду роста бактерии *G. ferrihydriticus* (штамм Z-0531) [1]. В ряде экспериментов в среду роста культуры, содержащую синтетический магнетит, добавлялась сера. Кроме того, был исследован рост бактерии в присутствии природного магнетита. Мёссбауэровские измерения проводились при комнатной температуре и при 81 К, а также во внешнем магнитном поле 1.03 Тл. Были исследованы также магнитные свойства образцов: проведены исследования зависимости намагниченности от температуры во внешнем магнитном поле 10 кЭ в режимах ZFC/FC в диапазоне температур 80 ÷ 300 К, получены кривые перемагничивания.

Исследования роста бактерии в присутствии синтетического магнетита показали, что наблюдается восстановление атомов Fe<sup>3+</sup> с образованием сидерита, в первых пересевах культуры с ферригидрита. В последующих пересевах способность бактерии к восстановлению атомов железа угасает. В процессе роста бактерии в присутствии синтетического магнетита и серы в среде образование сульфидов железа не было обнаружено. При росте бактерии в присутствии природного магнетита происходило восстановление атомов Fe<sup>3+</sup> в структуре магнетита с образованием новых фаз, содержащих атомы как Fe<sup>2+</sup>, так и Fe<sup>3+</sup>.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Zavarzina D. G. *Geoalkalibacter ferrihydriticus* gen. nov. sp. nov., the first alkaliphilic representative of the family Geobacteraceae, isolated from a soda lake / D. G. Zavarzina, T. V. Kolganova, E. S. Boulygina et al. // *Microbiol.* – 2006 – V. 75. – № 6. – P. 673–682.

## Термические превращения наноразмерного $\text{Fe}_3\text{O}_4$ в присутствии гуминовых веществ

Анучина М.М., Воробьева Н.А., Панкратов Д.А.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

pankratov@radio.chem.msu.ru, anuchina\_mariya@mail.ru

### Thermal transformations of nanosized $\text{Fe}_3\text{O}_4$ with humic substances

Anuchina M.M., Vorobyeva N.A., Pankratov D.A.

The aim of the work was to research  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @HS particles with the size  $\sim 45$  nm and  $\sim 90$  nm formed as a result of thermal transformations by means of Mössbauer spectroscopy. The size of initial particles, content of organic substance and presence of metallic iron impurities were shown to be the key factors affecting composition of transformations products formed by  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @HS nanoparticles heated in air.

Благодаря наличию в своем составе как гидрофильных, так и гидрофобных фрагментов, гуминовые вещества (ГВ), относящиеся к природным полиэлектролитам, способны выступать в качестве ПАВ, широко применяемых для стабилизации наноразмерных частиц, в частности железосодержащих. Ранее нами показано, что при взаимодействии водных растворов ГВ с металлическим железом могут

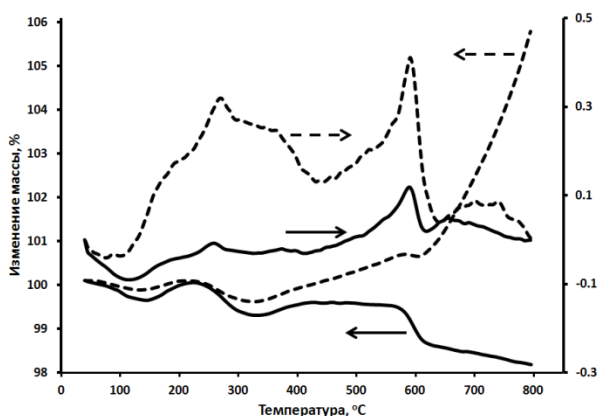


Рис. 1. Данные термического анализа для  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @ГВ с размерами частиц  $\sim 45$  нм (сплошная линия) и  $\sim 90$  нм (пунктирная)

быть получены суспензии, содержащие наноразмерные частицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @ГВ. Из образованных суспензий были выделены и охарактеризованы различными методами препараты, содержащие частицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @ГВ с размерами  $\sim 5$  нм и  $\sim 90$  нм. Из данных термогравиметрического анализа для этих препаратов следует, что в интервале температур от  $200$  °С до  $800$  °С на воздухе они претерпевают температурные превращения отличные друг от друга (рис. 1). Так, если для частиц с размерами  $\sim 45$  нм наблюдается потеря массы, то для частиц с размерами  $\sim 90$  нм фиксируется ее возрастание. Очевидно, что различия в механизмах термических превращений этих препаратов обусловлены такими факторами, как размер частиц, содержание органического вещества, наличие примесей исходного металлического железа. В настоящей работе методом мёссбауэровской спектроскопии изучены продукты отжига при различных температурах наноразмерных частиц  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @ГВ, с целью установления влияния на их состав выше указанных факторов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 16-14-00167.

## Мёссбауэровские исследования процессов восстановления атомов железа в ферригидрите алкалофильной бактерией

Чистякова Н.И.<sup>1</sup>, Грачева М.А.<sup>1</sup>, Антонова А.В.<sup>1</sup>, Шапкин А.А.<sup>1</sup>,  
Жилина Т.Н.<sup>2</sup>, Заварзина Д.Г.<sup>2</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт Микробиологии им. С.Н. Виноградского РАН, Москва (Россия)

ma.gracheva@physics.msu.ru

### Mössbauer studies of iron reduction process in ferrihydrite by alkaliphilic bacterium

Chistyakova N.I., Gracheva M.A., Antonova A.V., Shapkin A.A.,  
Zhilina T.N., Zavarzina D.G., Rusakov V.S.

Alkaliphilic bacterium *Fuchsiella ferrireducens* (strain Z-7101), capable of iron reduction, was isolated from the bottom sediments extracted from soda lake Tanatar III (Altai, Russia). Two sets of samples were investigated: in the first set ethanol was added to the cultivation medium, in the second set acetate was added.

В настоящей работе были проведены мёссбауэровские исследования процессов железоредукции при росте диссимиляторной алкалофильной бактерии *Fuchsiella ferrireducens* (штамм Z-7101) в среде с пониженной кислотностью. Бактерия была выделена из донных осадков содового озера Танатар III (Алтай, Россия). В среду роста был добавлен синтетический ферригидрит (СФ). Были исследованы две серии образцов: в первой серии в среду роста культуры был добавлен этанол, во второй – ацетат. Для обеих серий были проведены исследования при комнатной температуре и при  $T = 82$  К.

Проведенные исследования показали, что при росте бактерии на этаноле происходило формирование новой фазы (сидерита), содержащей атомы  $Fe^{2+}$ , и магнитоупорядоченной фазы (МФ), содержащей атомы  $Fe^{3+}$ . Анализ спектра при  $T = 82$  К позволил сделать вывод, что формирующаяся МФ является смесью гематита и маггемита, и в процессе роста бактерии происходило образование наночастиц, демонстрирующих суперпарамагнитное поведение.

Исследования показали, что при росте на ацетате также происходило восстановление атомов  $Fe^{3+}$  в структуре СФ и большая часть образовавшихся атомов  $Fe^{2+}$  находится в структуре сидерита. Анализ спектра при  $T = 82$  К показал, что в этой серии МФ не образуется.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Zhilina T. N. *Fuchsiella ferrireducens* sp. nov., a New Haloalkaliphilic, Lithoautotrophic Homoacetogen Capable of Iron Reduction, and Emendation of the Description of the Genus *Fuchsiella* / T. N. Zhilina, D. G. Zavarzina, E. N. Detkova, E. O. Patutina and B. B. Kuznetsov // Int. J. Syst. Evol. Microbiol. – 2015. – 65. – P. 2432-2440.

## Исследование фрагментов метеорита «Челябинский» методом ядерной гамма-резонансной спектроскопии

Гусейнов М.М.<sup>1</sup>, Таскаев С.В.<sup>2</sup>, Камиллов И.К.<sup>1</sup>, Казанова Э.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики ДНЦ РАН, Махачкала (Россия)

<sup>2</sup>Челябинский государственный университет», Челябинск (Россия)

gusmagm@yandex.ru

### Study meteorite fragments “Chelyabinsk” by nuclear gamma-resonance spectroscopy

Guseynov M.M., Taskaev S.V., Kamilov I.K., Kasanova E.

The results of the Mössbauer studies of one of the fragments (№ 2) meteorite "Chelyabinsk" over a wide temperature range showed presence of iron ions in the fractions of different crystallographic positions and physical-chemical conditions. The temperature dependences of the main parameters of the Mössbauer spectra of  $^{57}\text{Fe}$  nuclei in certain temperature ranges undergo jumps, indicating the structural phase transitions, contributing to the formation of favorable conditions for the magnetic ordering. As a result, the effective magnetic field in the iron nuclei in the temperature range (570 – 650 K) grow from 100 to 500 kOe.

Результаты мёссбауэровских исследований фрагментов метеорита «Челябинский» в широком интервале температур показали наличие в них фракций ионов железа в разных

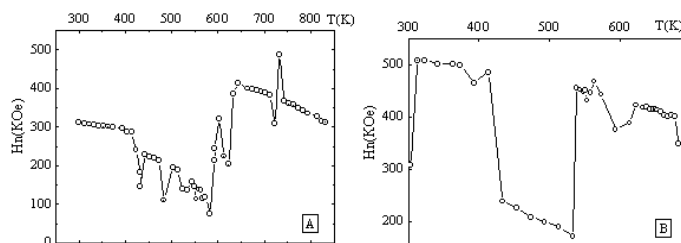


Рис. 1. Температурная зависимость эффективных магнитных полей на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  во фрагментах №1(В) и №2(А) метеорита «Челябинский»

кристаллографических положениях и физико-химических состояниях. Температурные зависимости основных параметров мёссбауэровских спектров ядер  $^{57}\text{Fe}$  в отдельных интервалах температур претерпевают скачки, указывающие на структурные фазовые переходы, способствующие формированию благоприятных для магнитного упорядочения состояний. На рис.1 даны температурные зависимости эффективных магнитных полей на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  во фрагментах №1(В) и №2(А). Спектры измерялись на спектрометре MS-1104Em в режиме постоянных ускорений. Источник  $\gamma$ -излучения –  $^{57}\text{Co}(\text{Cr})$ . Образцы готовились измельчением в агатовой ступе порошка фрагментов метеорита (размер частиц  $\approx 0.01 - 0.02$  мм). Модельная расшифровка спектров осуществлялась с помощью программы UnivemMS. Значение  $\chi^2$  не превышало 1.5. Для калибровки шкалы скоростей использовалось  $\alpha\text{-Fe}$ .

## **Мёссбауэровская спектроскопия магнитной фракции из глубоководных океанических отложений**

**Седьмов Н.А., Залуцкий А.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.**

*Ярославский государственный технический университет, Ярославль (Россия)*  
zalutskii@mail.ru

### **Mössbauer spectroscopy of the magnetic fraction from deep ocean sediments**

Sed'mov N.A., Zalutskii A.A., Shkolnikov E.N., Morozov V.V.

By Mössbauer spectroscopy, scanning electron microscopy and thermomagnetic analysis 13 samples of the magnetic fraction have been studied. The samples were extracted by magnetic separation from deep-sea clays of the Indian and Pacific oceans. Non-stoichiometric magnetite and hematite are the main minerals of the samples. Mössbauer data indicate isomorphic substitutions in the lattice of magnetite.

Методом мёссбауэровской спектроскопии, электронной растровой микроскопии и термомагнитного анализа изучены две партии магнитных микрочастиц из глубоководных донных отложений. Первая партия (5 образцов) получена методом магнитной сепарации из глубоководных глин, поднятых с глубины 5000 м в Западно-Австралийской котловине Индийского океана. Вторая партия (8 образцов) извлечена из глинистых донных отложений Тихого океана, поднятых с глубины 5700 м.

С помощью растровой электронной микроскопии изучались морфология и гранулометрический состав образцов. Установлено, что образцы состоят из черных непрозрачных частиц неправильной формы. Иногда встречаются кристаллы октаэдрической формы свойственные магнетиту. Ряд частиц имеют правильную сферическую форму, но их количество не превышает 1 – 2 % от общего числа частиц.

Мёссбауэровские спектры всех изученных образцов весьма сходны между собой. Основным минералом, входящим в состав магнитной фракции из донных отложений, является магнетит. В некоторых образцах обнаружено незначительное количество гематита, который образовался, вероятно, при окислении магнетита.

Отличительная особенность магнетита, зафиксированная по мёссбауэровским спектрам, его нестехиометричность. В большинстве спектров имеется заметное уширение линий секстета, ответственного за магнетит. Это может свидетельствовать об изоморфных замещениях в решетке магнетита. Дополнительно механизм замещения подтверждается тем, что по данным термомагнитного анализа температура Кюри большинства исследованных образцов ниже на 30 – 40°C, чем у «чистого» магнетита. С математической точки зрения, представленные спектры можно с достаточно хорошей точностью описать не двумя, а тремя секстетами. При этом полуширины линий в секстетах магнетита близки, а величина критерия  $\chi^2$  несколько ниже, чем при аппроксимации исходного спектра двумя секстетами.



## Мёссбауэровские исследования халькогенидов железа

Медвецкая И.Ю.<sup>1</sup>, Чистякова Н.И.<sup>1</sup>, Бычков А.Ю.<sup>1</sup>, Козеренко С.В.<sup>2</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского, Москва (Россия)

irina.medv94@gmail.com

### Mössbauer studies of iron chalcogenides

Medvetskaya I.Yu., Chistyakova N.I., Bychkov A.Yu., Kozerenko S.V., Rusakov V.S.

Three different types of hydrothermal synthesis of iron sulphides and selenides were investigated. Amorphous hydrated iron monosulfide; aluminum sulfide  $Al_2S_3$ ; aluminum selenide  $Al_2Se_3$  were used as precursors for these syntheses.

Реакции сульфидообразования считаются важным фактором в глобальных циклах углерода, серы и железа в условиях земной коры. Селениды железа не так распространены, однако их полупроводниковые свойства представляют огромный интерес для изучения.

Целью данной работы было исследование методами мёссбауэровской спектроскопии различных способов гидротермального синтеза сульфидов и селенидов железа в случае использования в качестве прекурсора: аморфного гидратированного моносulfида железа; сульфид алюминия  $Al_2S_3$ ; селенида алюминия  $Al_2Se_3$ .

Мёссбауэровские исследования проводились при комнатной температуре с использованием источника  $^{57}Co$  в матрице Rh на спектрометре MC1101Э. В результате проведенных исследований получены следующие результаты:

1. В случае использования на начальных этапах синтеза аморфного гидратированного моносulfида железа в качестве прекурсора установлено, что при температурах синтеза от 20 °C до 140 °C из сульфидных минералов образуются только грейгит и маккиновит, при этом: а) увеличение времени синтеза, а так же повышение температуры синтеза от 120 °C до 140 °C приводит к увеличению относительного содержания грейгита; б) при температуре синтеза ниже 80 °C образуется плохо сформированный маккинавит, при температурах 120°C и 140 °C степень его раскристаллизованности повышается.

2. В случае использования на начальных этапах синтеза в качестве прекурсора сульфид алюминия  $Al_2S_3$  установлено, что: а) основными фазами, которые образуются в процессе синтеза, являются магнетит, пирротин и пирит; б) относительное содержание сульфидов железа возрастает при добавлении сульфата магния в реакционную смесь.

3. В случае использования на начальных этапах синтеза в качестве прекурсора селенида алюминия  $Al_2Se_3$  установлено, что: а) основными фазами, которые образуются в процессе синтеза, являются магнетит, маккинавит, гематит и смешанная фаза селенидов железа  $FeSe+FeSe_{2-x}$ ; б) при добавлении в реакционную смесь магния относительное содержание селенидов железа возрастает от 37.5 ат. % до 47 ат. %.

## Мёссбауэровские исследования процессов биогенного восстановления атомов железа в структуре природного глауконита

Чистякова Н.И.<sup>1</sup>, Пчелина Д.И.<sup>1</sup>, Шапкин А.А.<sup>1</sup>, Заварзина Д.Г.<sup>2</sup>,  
Гаврилов С.Н.<sup>2</sup>, Русаков В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Институт Микробиологии им. С.Н. Виноградского РАН, Москва (Россия)

di.pchelina@physics.msu.ru

### Mössbauer study of biogenic reduction processes of iron atoms in the structure of natural glauconite

Chistyakova N.I., Pchelina D.I., Shapkin A.A., Zavarzina D.G., Gavrilov S.N., Rusakov V.S.

Mössbauer study of biogenic reduction processes of iron atoms in the structure of natural glauconite were carried out for different times (0–960 hours) of cultivating the bacterium *C. thermautotrophica*. Changes in the structure of glauconite were not observed in the first stage. The formation of siderite  $\text{FeCO}_3$  was observed on the second stage, further there was an increase in the relative concentration of  $\text{FeCO}_3$ .

В работе методами мёссбауэровской спектроскопии впервые была исследована кинетика процесса бактериального преобразования структуры глауконита в процессе роста и жизнедеятельности бактерией *Carboxydocella thermautotrophica*, выделенной из наземных горячих источников долины Гейзеров на Камчатке. Время культивирования бактерии изменялось в пределах от 0 часов до 960 часов. Мёссбауэровские исследования проводились при комнатной температуре с использованием источника  $^{57}\text{Co}$  в матрице Rh на спектрометре МС1101Э, работающем в режиме постоянных ускорений. Обработка спектров проводилась в рамках модельной расшифровки парциальных спектров с использованием программы SpectrRelax. Было установлено, что процесс роста бактерии разделяется на три этапа. На первом этапе не наблюдаются изменения в структуре глауконита, что обусловлено ростом *C. thermautotrophica* за счет окисления CO. На втором этапе после полного исчерпания CO бактерией *C. thermautotrophica* наблюдается формирование новой фазы, являющейся сидеритом  $\text{FeCO}_3$ . На третьем этапе происходит абиогенное увеличение относительного содержания сидерита. На втором и третьем этапах роста бактерии с ростом времени культивирования бактерии возрастает относительное содержание атомов  $\text{Fe}^{2+}$  в структуре глауконита и уменьшается относительное содержание атомов  $\text{Fe}^{3+}$ , находящихся в октаэдрах структуры глауконита.

## Мёссбауэровское исследование глины стыкового соединения бревенчатого сооружения Торецкого поселения

**Пятаев А.В., Валиулина С.И., Иванова А.Г., Воронина Е. В.**

*Казанский федеральный университет, Казань (Россия)*

151Eu@mail.ru

### Mössbauer study of the clay from the log butt-joints of log building at the Toretское settlement

Pyataev A.V., Valiulina S.I., Ivanova A.G., Voronina E.V.

Comparing the clay samples from the log butt-joints and the samples of ceramic sherds from the Toretское settlement has been performed by Mössbauer spectroscopy. It is shown that the clay from log butt-joints of log building at the Toretское settlement and the clay used in the production of the old-Russian and "Slavyanoidnaya" pottery are identical.

С целью определения места изготовления сосудов древнерусского и, так называемого, славяноидного типов, обнаруженных на Торецком городском поселении раннего Казанского ханства [1], методом мёссбауэровской спектроскопии выполнен сравнительный анализ образца глиняной обмазки из межвенцового шва сгоревшей бревенчатой постройки и образцов керамических сосудов, массово представленных на Торецком поселении. В работе показана идентичность глины из межвенцового шва сооружения и глиняного сырья, использовавшегося при изготовлении горшечной древнерусской и славяноидной посуды Торецкого поселения [2].

Работа поддержана грантом РФФИ, проект № 16-06-00453 а.

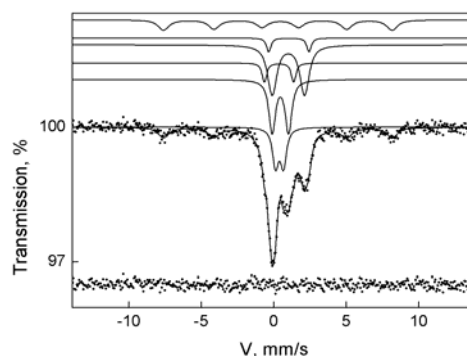


Рис. 1. Мёссбауэровский спектр образца глины из межвенцового шва бревенчатого сооружения Торецкого поселения, полученный при комнатной температуре

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Валиулина С.И. Международные связи раннего Казанского ханства по материалам Торецкого поселения // Русь и Восток в IX-XVI веках: новые археологические исследования / под ред. Макарова Н.А., Коваля В.Ю. – М: Наука, – 2010. – С. 183-191.
2. Пятаев А.В. Сырьевые ресурсы традиционного гончарного производства Билярской моноцентрической агломерации / А.В. Пятаев, С.И. Валиулина, А.Г. Иванова, Р.А. Манапов, Е.В. Воронина // Изв. РАН, сер. физ. – 2015. – Т. 79. – №8. – С. 1196-1199.

## Eastern Europe “triangular” lead-silica glass beads of the 11-early 12th centuries: Mössbauer studies

Valiulina S.I., Pyataev A.V., Ivanova A.G., Voronina E.V.

*Kazan Federal University, Kazan (Russia)*

151Eu@mail.ru

Within the large framework of problems concerning the genesis of the lead-silica (Pb-Si) glass production in the Eastern Europe, including the glass of the ancient Russia, the origin of the so-called "triangular-shaped" beads has recently emerged full blown. Elegant red-brown, dark gray or green beads (diameter 4–8 mm, 3–5 mm in height) look like triangles for three equally spaced convex yellow-green eyelets. There is a version that the triangular beads are of Byzantine origin, especially considering similarity of the color palette of opaque beads with coloring brown, yellow and green Byzantine mosaics and glazed ceramics. Triangular beads and Byzantine glazes are similar in chemical composition also. It is important to note that the area of the considered beads often coincides with the area of other Byzantine necklaces, bracelets, coins, parts of the belt headset, icons. In general, the list of sites and areas where the triangular beads were found, delineates a sufficiently wide area from the Rhine (Espenfeldt) to the Middle Volga and from the lower reaches of the Danube (Preslav) and the Azov Sea to Beloozero, to the Baltic States and Scandinavia. The largest number of triangular beads were found in Izmerskoe Village - large trade and handicraft factory in the late 10 – 11 centuries located in the Middle Volga at the mouth of the Kama. There are many successful examples of Mössbauer spectroscopy application for lead-silica glass analysis. Mössbauer spectra for a series of triangular beads were measured. The presence of the high-spin iron-oxides in the beads is convincingly demonstrated. As an example, spectrum of the sample prepared from beads of Izmerskoe Village obtained at room temperature. The spectrum of this sample contains the component corresponding to the magnetite –  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  with a partial area ~ 20 %. This fact suggests that a significant proportion of the bead material has a crystal, but not an amorphous structure, in contrast to the alkali glass, which is amorphous in its nature. The presence of the oxide in the glass composition can be correlated with the features of the raw base for the glass or can characterize the technological process of this type of glass. The Mössbauer study of triangular beads series from various sites (the Beloozero, the Mari burial mounds and the north-eastern Russia) allowed to differentiate the origin of the glass products of these monuments. Combined with petrographic and SEM methods the Mössbauer research provides an opportunity to determine the different sources of lead-silica beads of the same morphological type that were in use during the 11th - 12th centuries.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 16-06-00453 a).

*Topic VIII*

*New experimental methods and techniques*

# New model for acoustically induced Mössbauer sidebands from a single parent line

**Shakhmuratov R.N.<sup>1,2</sup>, Vagizov F.G.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Kazan Physical-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, Kazan (Russia)

<sup>2</sup>Kazan Federal University, Kazan (Russia)

shakhmuratov@kfti.knc.ru

Splitting of Mössbauer single parent line of the vibrated absorber into many sidebands was observed long time ago [1]. The intensity of the sidebands has not been yet satisfactory explained. There are two models of coherent and incoherent vibrations of nuclei in the absorber [2]. Coherent model implies piston-like vibration of the absorber giving the intensity of the  $n$ -th sideband proportional to the square of Bessel function  $J_n^2(m)$ , where  $m$  is the modulation index. Incoherent model is based on the Relay distribution of the nuclear-vibration amplitudes in the absorber giving the intensity proportional to  $\exp(-m^2)I_n(m^2)$ , where  $I_n(m^2)$  is the modified Bessel function. Both models and their combinations cannot describe accurately the absorption spectrum of vibrated absorber (see Fig. 1). We proposed a new distribution of the nuclear vibration amplitudes, which gradually changes depending on a particular parameter  $\sigma$ . Our distribution tends to delta-like, inherent to coherent model if  $\sigma \rightarrow 0$ , or it tends to Relay distribution inherent to incoherent model if  $\sigma \rightarrow 1$ . With this distribution we obtained excellent fitting of the experimental spectra (see Fig.2).

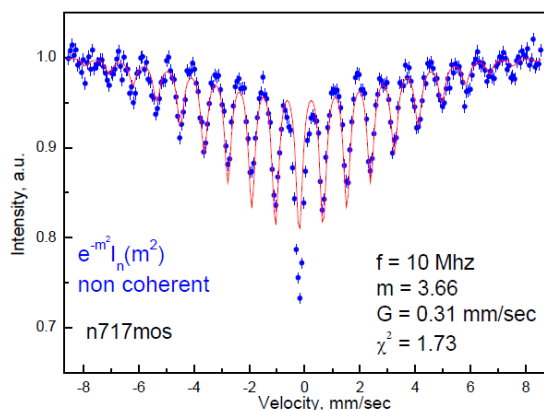


Fig. 1. Experimental spectrum for enriched  $K_4Fe(CN)_6 \cdot 3H_2O$  (dots) and conventional fitting (solid line) [2]

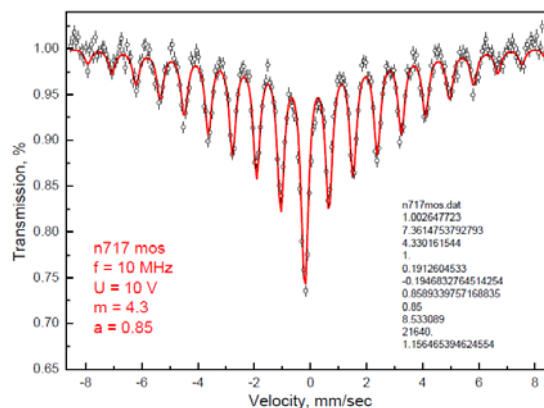


Fig. 2. Experimental spectrum for enriched  $K_4Fe(CN)_6 \cdot 3H_2O$  (circles) and fitting with the help of our model (solid line)

## REFERENCES

1. Ruby S. L. Acoustically modulated gamma rays from  $^{57}Fe$  / S. L. Ruby, D. I. Bolef // Phys. Rev. Lett. – 1960. – V. 5. – № 1. – P. 5–7.
2. Chien C. L. Mössbauer sideband from a single parent line / C. L. Chien, J. C. Walker // Phys. Rev. B – 1976. – V. 13. – № 5. – P. 1876–879.

# Регистрация спектра излучения мёссбауэровского источника $^{119m}\text{Sn}$ сверхпроводящими туннельными детекторами

Ромашкина И.Л.<sup>1</sup>, Козин М.Г.<sup>1</sup>, Кошелец В.П.<sup>2</sup>, Филиппенко Л.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)

<sup>2</sup>ИРЭ им. Котельникова РАН, Москва (Россия)

irrom@srd.sinp.msu.ru

## Registration of the radiation from Mössbauer $^{119m}\text{Sn}$ source with superconducting tunnel junction detectors

Romashkina I.L., Kozin M.G., Koshelets V.P., Filippenko L.V.

Pulse-height spectra from  $^{119m}\text{Sn}$  Mössbauer source were registered with Nb-based superconducting tunnel junction detectors.

Ранее нами продемонстрирована возможность регистрации рентгеновского излучения Fe  $K_{\alpha}$  и  $K_{\beta}$ ,  $\gamma$ -лучей 14.41 кэВ от источника  $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$  [1], а также конверсионных электронов, возникающих при облучении этим источником резонансного рассеивателя  $\text{RhFe}$  [2], с помощью СТП-детекторов на основе ниобия (СТП – сверхпроводящий туннельный переход). В данной работе с помощью таких детекторов проведена регистрация спектра излучения мёссбауэровского источника  $^{119m}\text{Sn}$  (рис. 1).

В качестве детекторов использовались СТП размером 100 и 150 мкм со структурой  $\text{Ti/Nb/Al,AlO}_x/\text{Al/Nb/NbN}$  (толщины 30/100/8.1/13/150/30 нм). Источник располагался над чипом с детекторами в низкотемпературной камере, заполненной теплообменным гелием. Измерения проведены при  $T = 1.4$  К в магнитном поле порядка 100 Э, приложенном в плоскости туннельного перехода. Мёссбауэровская  $\gamma$ -линия не видна из-за малой толщины детектора и низкой активности источника.

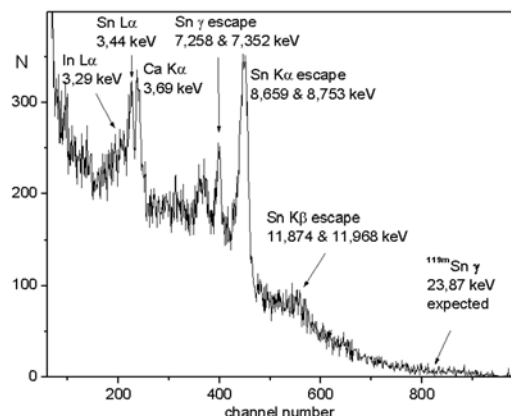


Рис. 1. Спектр излучения мёссбауэровского источника  $^{119m}\text{Sn}$  в матрице  $\text{CaSnO}_3$ , полученный с помощью СТП-детектора

### ЛИТЕРАТУРА

1. Козин М.Г. Регистрация спектра излучения мессбауэровского источника  $^{57}\text{Co}$  сверхпроводящим туннельным детектором / М.Г. Козин, И.Л. Ромашкина, С.А. Сергеев, Л.В. Нефедов, В.П. Кошелец, Л.В. Филиппенко // ПТЭ. – 2006. – № 5. – С. 1-5.
2. Kozin M.G. Observation of nuclear gamma resonance with superconducting tunnel junction detectors / M.G. Kozin, I.L. Romashkina, L. V. Filippenko, V.P. Koshelets // AIP Advances. – 2016. – V.6. – № 25315. – P.1-10.

# Электронная мёссбауэровская спектроскопия

**Козин М.Г., Ромашкина И.Л.**

*НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*

*kozin@srd.sinp.msu.ru*

## Electron Mössbauer spectroscopy

Kozin M.G., Romashkina I.L.

State of the art in the conversion electron Mössbauer spectrometry (CEMS) is briefly surveyed. Application of superconducting tunnel junction detectors for this method is proposed.

Методики CEMS рассмотрены в обзоре [1]. В докладе предполагается дать краткую характеристику различных способов регистрации электронов с акцентом на те из них, которые могут быть использованы при температурах ниже комнатной.

Мы ищем возможности применения в этом методе детекторов на основе сверхпроводящих туннельных переходов (СТП). Эта работа начинается с регистрации с их помощью спектров излучения мёссбауэровских источников. Используя детекторы на основе Nb, для  $^{57}\text{Co}$  нам удалось зарегистрировать электронные сигналы, возникающие при разрядке мёссбауэровского ядра  $^{57}\text{Fe}$  [2]. Аналогичная работа для  $^{119\text{m}}\text{Sn}$  находится на начальном этапе.

Из-за малой площади и толщины СТП детекторов исследуемый образец надо помещать в криостате в непосредственной близости к ним, а источник вне криостата должен иметь достаточно высокую активность. Основным преимуществом СТП детекторов является их высокое энергетическое разрешение, превышающее разрешение не только газовых, но и полупроводниковых детекторов. Это позволяет отдельно регистрировать электроны разных энергий и благодаря этому получать селективную по глубине информацию.

Результаты, получаемые с помощью СТП детекторов, могут быть сопоставлены с достижениями группы Савицкого, полученными с использованием каналтронов, и с результатами группы японских авторов, длительное время разрабатывавших заполненные гелием газовые счётчики (см. ссылки в [1]).

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Nomura K.* Applications of conversion electrons Mössbauer spectrometry (CEMS) / K. Nomura, Y. Ujihira, A. Vertes // *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. Articles.* – 1996. – № 1-2. – P. 103-199.
2. *Kozin M.G.* Observation of nuclear gamma resonance with superconducting tunnel junction detectors / M.G. Kozin, I.L. Romashkina, L. V. Filippenko, V.P. Koshelets // *AIP Advances.* – 2016. – V. 6. – № 25315. – P. 1-10.



## Компьютерная программа для групповой обработки мёссбауэровских спектров «Happy Sloth»

Левин Д.М.<sup>1</sup>, Дедушенко С.К.<sup>1</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Лялин пер. 24/26-43, Москва (Россия)

<sup>2</sup>Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

dedushenko@mail.ru

### Happy Sloth PC program for the collective fitting of Moessbauer spectra

Levin D.M., Dedushenko S.K. and Perfiliev Yu.D.

New PC software allowing to fit several Mössbauer spectra together can be downloaded from the web-site [www.HappySloth.ru](http://www.HappySloth.ru).

Хорошо известно, что при обработке мёссбауэровских спектров на параметры функции, описывающей экспериментальную кривую поглощения, налагаются связи. Наложение связей может принести пользу и при совместной обработке нескольких спектров. Если, например, набор спектров соответствует стадиям разложения вещества, то связывание между собой параметров компонент различных спектров (изомерных сдвигов, квадрупольных расщеплений и пр.), относящихся к одному химическому состоянию мёссбауэровского элемента (в частности, к исходному состоянию) может быть разумным и полезным.

Возможность обрабатывать одновременно несколько спектров с наложением указанных связей предоставляет программа Happy Sloth, которая адаптирована для работы с ОС Windows 10. Программа распространяется бесплатно через сайт [www.HappySloth.ru](http://www.HappySloth.ru).

Спектры в программе аппроксимируются только дублетами. Форма каждой линии дублета соответствует профилю Фойгта. Значение функции Фойгта определяется путем прямого численного интегрирования. Для ускорения вычислений генерируется таблица интегралов объемом около 1Гб, которая загружается в оперативную память. Любые пары параметров одного или разных спектров могут быть связаны между собой линейным уравнением либо неравенством с дополнительным плавающим слагаемым, позволяющим программе варьировать установленное соотношение в некотором интервале. Предусмотрена возможность «заморозки» любого количества загруженных спектров, что позволяет обрабатывать только необходимую выборку, например, один спектр.

При разработке ставилась цель максимально упростить интерфейс. В программе не используются размерности, нет специального ввода для калибровок и пр. Общение с программой осуществляется стандартной мышью с двумя кнопками и колесом; клавиатура необходима только для ввода буквенно-цифровой информации. Для удобства работы рекомендуется использовать несколько мониторов, установленных в ряд.

Программа имеет возможности для выбора алгоритмов вычисления, а также для оптимизации взаимодействия с ОС.

## Метод корректного учёта толщины поглотителя при обработке мёссбауэровских спектров в программе DISCOVER

**Бокков А.В.<sup>1</sup>, Перфильев Ю.Д.<sup>3</sup>, Филиппов В.П.<sup>1</sup>, Чуев М.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва (Россия)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт Российской академии наук, Москва (Россия)

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва (Россия)

av.bokov@yandex.ru

### Method of the correct account for the absorber thickness when processing Mössbauer spectra in the program DISCOVER

Bokov A.V., Perfiliev Yu.D, Filippov V.P., Chuev M.A.

Method of the correct account for the thickness of the Mössbauer absorber is applied to analyse spectra of reference samples for establishing fraction of resonant  $\gamma$ -quanta in total radiation flux. The correction procedure for the experimental data is compared with the direct calculation of the spectra of thick samples to determine its effect on the correlation properties of the original data.

В настоящей работе решается задача определения доли резонансных  $\gamma$ -квантов в общем потоке излучения путём измерения спектров эталонных образцов заданной толщины с последующим анализом в программе обработки мёссбауэровских данных “DISCOVER” [1]. Такой подход основан на возможности программы работать со спектрами «толстых» образцов благодаря процедуре коррекции данных на толщину поглотителя. Предложенный метод выгодно отличается от распространённого, но практически неконтролируемого способа «почти полного» отсека резонансных квантов. Обсуждается влияние процедуры коррекции на корреляционные свойства экспериментальных спектров на примере сравнения погрешностей модельных параметров, оцененных по «линеаризованным» данным, с найденными путём прямого расчёта кривых поглощения «толстых» образцов (см. таблицу 1).

Таблица 1. Мёссбауэровские параметры образца  $K_4[Fe(CN)_6]$  с плотностью  $30 \text{ мг/см}^2$  и их погрешности при обработке скорректированного спектра и при анализе исходных данных

Эффективная толщина поглотителя	Ошибка при коррекции спектра	0.697	0.002
	Истинная ошибка		0.003
Изомерный сдвиг, мм/с	Ошибка при коррекции спектра	0.2198	0.0003
	Истинная ошибка		0.0003
Лоренцево уширение линии, мм/с	Ошибка при коррекции спектра	0.0249	0.0009
	Истинная ошибка		0.0009

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Афанасьев А.М. Дискретные версии мессбауэровских спектров / А.М. Афанасьев, М.А. Чуев // ЖЭТФ. – 1995. – Т. 107. – Вып. 3. – С. 989–1004.

# Application of Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution: principles, problems and advances

**Oshtrakh M.I., Semionkin V.A.**

*Institute of Physics and Technology, Ural Federal University,  
Ekaterinburg (Russian Federation)  
oshtrakh@gmail.com*

One of the ways of further development of conventional Mössbauer spectroscopy is related to increase in velocity resolution (discretization of the velocity reference signal) for both spectrometer and the spectrum. This leads to more precise adjustment to resonance due to a smaller Doppler modulation energy step for resonant  $\gamma$ -rays. An increase in velocity resolution provides a decrease in the instrumental (systematic) velocity error and larger number of spectral points which fit much better the features of the absorption line shape [1]. We compare the results of the high velocity resolution and conventional Mössbauer spectra measurements (see Figs. 1 and 2) as well as discuss problems and difficulties of the high velocity resolution Mössbauer spectra measurement.

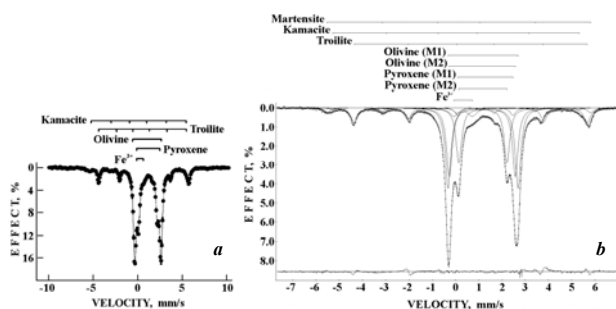


Fig. 1. Comparison of the RT Mössbauer spectra of Mount Tazerzait L5 meteorite measured with a low (**a**, [2]) and high (**b**) velocity resolution

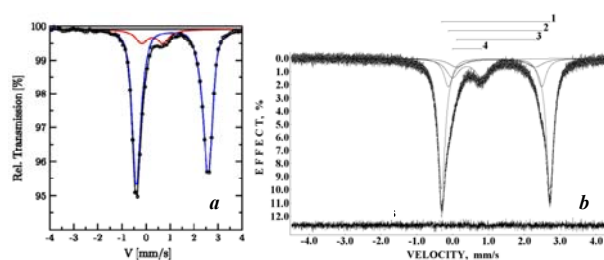


Fig. 2. Comparison of the RT Mössbauer spectra of Ascofer® medicament measured with a low (**a**, [3]) and high (**b**) velocity resolution

This work was supported in part by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project No 2085).

## REFERENCES

1. *Oshtrakh M.I.* Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution: advances in biomedical, pharmaceutical, cosmochemical and nanotechnological research / M.I. Oshtrakh, V.A. Semionkin. // *Spectrochim. Acta, Part A: Molec. Biomolec. Spectr.* – 2013. – V. 100. – P. 78–87.
2. *Galazka-Friedman J.* Mössbauer studies of Soltmany and Shisr 176 meteorites – comparison with other ordinary chondrites / J. Galazka-Friedman, K. Szlachta, Ł. Karwowski, M. Woźniak // *Hyperfine Interact.* – 2014. – V. 226. – P. 593–600.
3. *Dubiel S.M.* Effect of time and storing conditions on iron forms in ferrous gluconate and Ascofer® / S.M. Dubiel, J. Cieślak, R. Gozdyra // *J. Mol. Struct.* – 2011. – V.991. – P. 171–177.

## Оптимизация мёссбауэровского эксперимента в геометрии на пропускание

**Гребенюк А.В.<sup>1</sup>, Панчук В.В.<sup>1,2</sup>, Иркаев С.М.<sup>1</sup>, Семенов В.Г.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург (Россия)*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург (Россия)*

*yax-light@yandex.ru*

### Optimization of the Mössbauer experiment in the transmission geometry

Grebenyuk A.V., Panchuk V.V., Irkaev S.M., Semenov V.G.

The technique of numerical determination of the optimum absorber thickness based on direct calculation of the transmission integral is proposed. It allows us to receive a given signal/noise ratio in the minimum experimental time. The influence of the matrix atoms on the value of the absorber optimum thickness is discussed.

The influence of the geometry of experiment on the different parameters of spectral lines is considered. Methodical recommendations on the selection of the optimum geometry depending on the nature of the sample are given.

Одним из важнейших параметров, влияющих на качество спектра, является толщина исследуемого поглотителя. В настоящей работе предложена методика численного определения оптимальной толщины из первых принципов, которая дает лучшее совпадение с экспериментом по сравнению с имеющимися в литературе подходами. В ходе исследования был сделан вывод о том, что прибегать к предварительному расчету оптимальной толщины наиболее целесообразно в случае тяжелых матриц и низких концентраций резонансных атомов или малых значений фактора Лэмба—Мёссбауэра. Показано, что наличие фонового излучения не влияет на положение максимума отношения сигнал/шум, которое соответствует значению оптимальной толщины.

Другим важным фактором, влияющим на информативность спектра, являются геометрические условия эксперимента. В настоящей работе на основе имеющихся в литературе алгоритмов были смоделированы спектры различных соединений железа, показаны зависимости искажения различных параметров спектральных линий от степени неколлимированности пучка. Даны методические рекомендации по выбору оптимальной геометрии проведения мёссбауэровского эксперимента.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Гребенюк А.В.* Расчет из первых принципов оптимальной толщины поглотителя в мёссбауэровской спектроскопии / *А.В. Гребенюк, С.М. Иркаев, В.В. Панчук, В.Г. Семенов* // *Научное приборостроение.* – 2016. – Т. 26. – № 1. – С. 47-53.

## Применение нейросетей в задачах мёссбауэровской спектроскопии

Гостев Р.А., Бакиров Б.А., Дулов Е.Н.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет (Россия)*  
mail@57fe.ru

### Artificial neural networks applied to Mössbauer spectroscopy

Gostev R.A., Bakirov B.A., Dulov E.N.

Preliminary results of artificial neural networks applications in the field of Mössbauer spectroscopy have been discussed. There are two applications considered in this work: digital pulse processing and spectral data fitting.

Искусственные нейронные сети, в соответствии с известной теоремой Колмогорова, которая в середине XX века позволила решить 13-ю проблему Гильберта, могут рассматриваться как эффективный способ построения аппроксимаций для функций многих переменных. В свою очередь, аппроксимация экспериментальных данных (задача фиттинга) может быть рассмотрена как задача построения вектор-функций многих переменных, аргументами которой являются входные данные, а результатом – упорядоченная совокупность определяемых параметров.

В мёссбауэровской спектроскопии нейросети могут оказаться полезными в двух областях. Во-первых, это задача распознавания импульсов в сигнале с детектора и анализа их амплитуд. В цифровой обработке импульсного сигнала применение нейросетей известно около 20 лет [1] и имеет как преимущества, так и недостатки. В настоящее время элементная база цифровой электроники позволяет говорить о встраиваемых применениях нейросетей, при этом актуальным для применений в мёссбауэровской спектроскопии оказывается вопрос оценки вычислительной сложности нейросетевых алгоритмов, в частности, применительно к сигналу с плохим отношением сигнал/шум.

Во-вторых, задача аппроксимации функций возникает при обработке мёссбауэровских спектров. В этой области применение нейросетей, по крайней мере, позволяет говорить о потенциальном сокращении рутинной работы при обработке простых спектров.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Kamleitner J.* Comparative analysis of digital pulse processing methods at high count rates / *J. Kamleitner* // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.* 2014. – V. 736. – P. 88–98.

## Реализация задаваемых пользователем моделей парциальных спектров в программе SpectrRelax

Мацнев М.Е., Русаков В.С.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*  
mike@haali.su

### Implementation of user-defined subspectrum models in SpectrRelax

Matsnev M.E., Rusakov V.S.

SpectrRelax has a large number of built-in models and a way to express linear and not linear dependencies between model parameters [1]. Unfortunately it becomes rather difficult to work with models as the number of subspectra and analytical expressions of model parameters increases. To overcome this difficulty we implemented a way to extend SpectrRelax with user-defined models. These models are written in Lua language and are transparently integrated into the application. Extension mechanism demonstrated on the example of the Laves model for processing and analysis of spectra of  $^{57}\text{Fe}$  nucleus in the rare earth laves phases with a C15 structure.

Программа SpectrRelax предназначена для обработки и анализа мёссбауэровских спектров. В программе предусмотрено большое число моделей парциальных спектров, таких как синглет, дублет, секстет, релаксационные модели, модели спиновых волн, и т. д. Кроме этого есть возможность с помощью введения варьируемых параметров и создания аналитических выражений задавать практически произвольные связи между параметрами парциальных спектров [1]. Этих возможностей достаточно для конструирования моделей любой сложности, но по мере увеличения числа парциальных спектров, аналитических выражений и связей между параметрами заметно растёт трудоёмкость составления общей модели. Для упрощения работы с программой нами реализована возможность расширения набора моделей парциальных спектров без изменения самой программы. Пользователь может создавать собственные модели на языке Lua, при этом они прозрачно интегрируются в SpectrRelax, и работа с такими моделями не отличается от работы с моделями, встроенными в программу. Такой способ расширения возможностей SpectrRelax продемонстрирован на примере модели Laves для обработки и анализа спектров ядер  $^{57}\text{Fe}$  в редкоземельных фазах Лавеса со структурой C15. Создание модели Laves в интерфейсе SpectrRelax позволило сократить число парциальных спектров с 4 до 1, избавиться от необходимости введения варьируемых параметров и аналитических выражений со связями между параметрами.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Matsnev M.E. SpectrRelax – an Application for Mössbauer Spectra Modeling and Fitting / M.E. Matsnev, V.S. Rusakov // AIP Conference Proceedings. – 2012. – V. 1489. – P. 178–185.

# Неопределенность измерений и новые правила составления метрологических стандартов для методики калибровки спектрометров Мёссбауэра

**Назипов Р.А.<sup>1</sup>, Выжимов Ю.М.<sup>1</sup>, Зюзин Н.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань (Россия),*

<sup>2</sup>*Казанский федеральный университет, Казань (Россия)  
rusnazipov@kstu.ru*

## Uncertainty of measurement and new rules drafting documents of metrological standards for calibrate Mössbauer spectrometers

Nazipov R.A., Vyzhimov Yu.M., Zyuzin N.A.

The report addresses issues of standardization and uncertainty of measurement in calibration for Mössbauer spectrometers from the point of view recommendations of Russian and international metrological organizations.

К настоящему времени методика калибровки спектрометров Мёссбауэра (ЯГРС) не приведена к единому межгосударственному стандарту согласно рекомендациям Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM) [1]. Также и в ГСИ РФ нет нормативных документов, в которых приведены рекомендации для калибровки ЯГРС.

В РФ в недавнее время принят ряд документов [2] согласующихся с JCGM и вводящие новое понятие: «неопределенность измерения» вместо привычного понятия «погрешность измерений». На неопределенность измерений калибровочных параметров влияют параметры ЯГРС и точность определения положения линий образцовых поглотителей или точность измерения скорости интерферометром. В настоящее время не сформулированы общие требования неопределенности измерений, определяемых в процессе калибровки ЯГРС, что создает определенные трудности при составлении методики калибровки. В ГОСТ 27681-88 была попытка сформулировать общие технические требования к ЯГРС, в том числе с точки зрения точности измерений, однако в этом документе не приведены методы калибровки и некоторые положения в нем являются устаревшими, в частности отсутствует оценка неопределенности измерений, и поэтому он требует пересмотра.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement. [Электронный ресурс]: JCGM 100:2008 – JCGM, 2008. – Режим доступа: [http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM\\_100\\_2008\\_E.pdf](http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf)
2. Неопределенность измерения. Часть 1. Введение в руководства по неопределенности измерения. [Текст]: ГОСТ 54500.1-2011 – Введ. 2012-01-10. – М: Стандартинформ, 2012. – 24 с. : ил.

## Описание спектров с учетом квадрата лоренциана

**Петров В.И., Мартыненко С.С., Филиппов В.П.**

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва (Россия)  
vipetrov@mephi.ru*

### Lorentzian square in description of spectra

*Petrov V. I., Martynenko S. S., Filippov V. P.*

A linear combination of the Lorentz's line and a square of the Lorentz's line has been chosen for describing the Be-Fe spectra registered with the use of the resonant detector. This function decreases the characteristic distortion of the differential spectrum.

Резонансный детектор создает специфическую форму линии, обусловленную вкладом квадрата функции Лоренца [1]. В настоящей работе для описания спектров использована функция  $L+kL^2$ , являющаяся линейной комбинацией функции Лоренца  $L$  и её квадрата. Найдены эмпирические коэффициенты  $k$  для 20 спектров сплавов бериллия с содержанием железа от 0.1 до 0.8 масс. %.

Мёссбауэровские измерения проведены на спектрометре МС1101Э с резонансным детектором RSDU (Ритверц). Спектры сплавов представляют собой хорошо разрешённые дублеты пересыщенного твердого раствора железа в бериллии. Для оценки качества описания рассчитывали величину  $\chi^2$  и относительную площадь разностного спектра.

Математическая подгонка коэффициента  $k$  дает, в общем, удовлетворительное описание спектров, характеризуемое более низкими значениями  $\chi^2$  (не более 8) и относительной площади разностного спектра (не более 7%), чем при обработке простым лоренцианом. Коэффициент  $k$  составляет от 1.2 до 2.9. Значения  $k$  несколько изменяются в зависимости от микроструктуры образца одного и того же сплава, также претерпевают изменения со сменой источника, но не обнаруживают зависимости от содержания железа в сплаве. Вычисленные мессбауэровские параметры принимают значения, совпадающие с литературными данными в пределах допустимой погрешности.

Обсуждается эффективность различных методов описания спектров, полученных для исходных твердых растворов железа в бериллии, а также после многоэтапной термообработки сплавов, сопровождающейся выделениями вторичных фаз. Результаты могут быть полезными при анализе процессов растворения и выделения, которые могут происходить при эксплуатации железосодержащих сплавов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Odeurs J.* Resonant-detector Mössbauer spectroscopic studies of Sn doped SiO<sub>2</sub> analysed using quantum mechanical theory / J. Odeurs, G.R. Hoy, C. L'Abbe, G.E. Koops, H. Pattin, R.N. Shakhmuratov, R. Coussement, N. Chiodini, A. Pallari // *Hyperfine Interactions*. – 2002. – V. 139/140. – P. 685–690.



# Оптимизация характеристик резонансного детектора $^{57}\text{Fe}$

**Сташенко В.В., Сарычев А.Д., Сарычев Д.А.**

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,  
Ростов-на-Дону (Россия)  
z\_machine@mail.ru*

## Performance optimization of resonant detector $^{57}\text{Fe}$

Stashenko V.V., Sarychev A.D., Sarychev D.A.

On the base of first-principle calculations influence of effective thickness, isomer shift and different cation surrounding of  $^{57}\text{Fe}$  of resonant converter on the basic emission and transmission Mössbauer spectra parameters were considered.

В работе, на основании проведенных расчетов, рассмотрено влияние эффективной толщины, величины изомерного химического сдвига и различного катионного окружения атомов железа в материале конвертора резонансного детектора на основные параметры измеряемых с их помощью эмиссионных и трансмиссионных мёссбауэровских спектров, а именно, величину эффекта резонансного поглощения, ширину экспериментальных линий и производительность измерений.

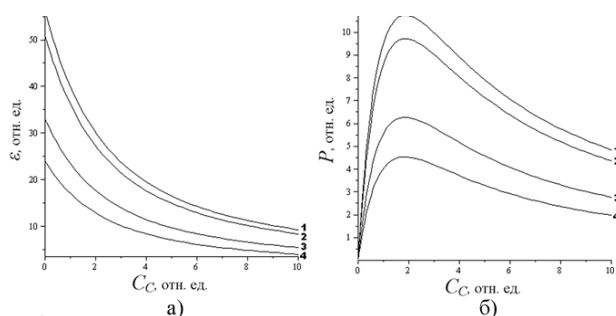


Рис. 1. Зависимости селективности (а) и производительности измерений (б) в эмиссионных экспериментах от эффективной толщины конвертора с одиночной линией поглощения для: 1 – «чистое» железо; 2 – бериллиевый ферроцианид  $\text{Be}_2\text{Fe}(\text{CN})_6$ ; 3 – калий-магниевый ферроцианид  $\text{K}_2\text{MgFe}(\text{CN})_6$ ; 4 – калиевый ферроцианид  $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$

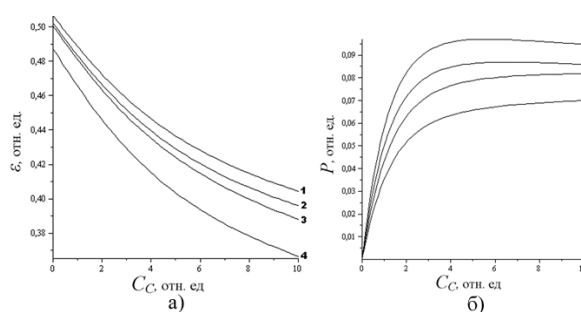


Рис. 2. Зависимости наблюдаемой относительной величины резонансного поглощения гамма-излучения в образце (а) и производительности измерений (б) в трансмиссионных экспериментах от эффективной толщины конвертора для: 1 – «чистое» железо; 2 – бериллиевый ферроцианид  $\text{Be}_2\text{Fe}(\text{CN})_6$ ; 3 – калий-магниевый ферроцианид  $\text{K}_2\text{MgFe}(\text{CN})_6$ ; 4 – калиевый ферроцианид  $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$

В расчете приняты во внимание конкурирующие каналы ядерного и фотопоглощения, а также вклад фоновых линий испускания источника  $^{57}\text{Co}$ . Наиболее эффективно применение резонансных детекторов при исследовании небольших эффектов резонансного поглощения, позволяющее существенно, в 1.8 раза, сократить время измерения по сравнению с использованием нерезонансных детекторов.

## Авторский указатель

<b>А</b>		Вей И.	61, 68
Абдуллин А.Ф.	83	Верещак М.Ф.	91, 92
Акуленко А.А.	50	Верин И.А.	39
Алексеева О.А.	39	Вершинин А.В.	63
Антонова А.В.	152, 156, 158	Власова Н.И.	41
Анучина М.М.	157	Волкова Л.Д.	142
Аринин В.В.	150, 151	Воробьева Н.А.	157
Артёмов В.В.	81	Воронина Е.В.	145, 163
Асташкин Р.А.	138	Востров Н.И.	101, 107
Афанасов М.И.	134, 138, 144	Выжимов Ю.М.	174
Афанасьев С.В.	76	<b>Г</b>	
Афонин М.В.	132	Габбасов Р.Р.	77, 129
Ахмеджанов И.Д.	133	Гаврилов Н.В.	94
Ахметов М.М.	128	Гаврилов С.Н.	152, 162
<b>Б</b>		Гаврилюк А.Г.	34
Базаров В.В.	90	Галагудза М.М.	132
Бакиров Б.А.	172	Гапочка А.М.	31, 44, 52
Балдохин Ю.В.	136	Гараев Р.Р.	133
Балуян Т.Г.	51	Гильмутдинов И.Ф.	70, 88
Баринов В.А.	99	Глазкова Я.С.	31, 44, 45, 50, 60, 61, 64, 68
Баталов Р.И.	115	Годовиков С.К.	53
Баюков О.А.	120, 123	Голобородский Б.Ю.	94
Баязитов Р.М.	115	Гостев Р.А.	172
Бедин С.А.	81	Грачева М.А.	152, 158
Безматерных Л.Н.	39	Гребенюк А.В.	171
Белик А.А.	31, 45, 52, 60, 61, 64, 65, 68	Груздев М.С.	83, 109
Боков А.В.	169	Гудим И.А.	39
Болтакова Н.В.	106	Гумаров А.И.	88
Бордюжин И.Г.	114	Гумаров Г.Г.	128
Бродский А.Р.	142	Гусаров В.В.	66
Бурханов Г.С.	48	Гусев А.А.	112
Бычков А.Ю.	161	Гусейнов М.М.	159
Бяков В.М.	47, 126	<b>Д</b>	
<b>В</b>		Дедушенко С.К.	135, 141, 168
Вагизов Ф.Г.	70, 88, 90, 147, 148	Должикова А.В.	131
Валеев В.Ф.	88	Домрачева Н.Е.	83, 109
Валиулина С.И.	163	Дулов Е.Н.	89, 90, 140, 172
Валиуллин А.А.	79	<b>Е</b>	
Ваттио А.	144	Елсуков Е.П.	100, 104, 139
Вахин А.В.	145	Ерёмина М.А.	139
Вахитов И.Р.	140	<b>Ж</b>	
		Жилина Т.Н.	152, 156, 158

<b>З</b>			
Завалишин В.А.	76	Кубрин С.П.	112, 118, 119
Заварзина Д.Г.	152, 156, 158, 162	Кулаков К.В.	52
Загайнов А.В.	100	Куликов Л.А.	47, 124, 126, 136
Загорский Д.Л.	81	Кулова Т.Л.	101, 107
Закарина Н.А.	142	Курчатов И.М.	154
Залуцкий А.А.	80, 160	<b>Л</b>	
Заматовский А.Е.	87, 98, 111, 113	Лабрюжер К.	134
Здоровец М.В.	82	Лагунцов Н.И.	154
Зиннатуллин А.Л.	88	Ладыгина В.П.	120
Зюзин Н.А.	174	Латыпова Р.И.	89
<b>И</b>		Левин Д.М.	168
Иванова А.Г.	109, 145, 163	Лекина Ю.О.	60, 61
Ивашутенко А.С.	105	Литвинов А.В.	76, 111, 113, 121
Иркаев С.М.	66, 171	Логинова Н.А.	129
Исупов В.П.	112	Ломаева С.Ф.	139
Исхаков Р.С.	120, 123	Ломанова Н.А.	66
<b>К</b>		Лосева Е.В.	129
Кадыржанов К.К.	82	Лукьянова Е.Н.	52, 82
Казанова Э.	159	Любутин И.С.	34, 39, 81
Камзин А.С.	79	Лядов Н.М.	90
Камилов И.К.	159	Ляшков К.А.	98, 113
Камнев А.А.	124, 143	<b>М</b>	
Катаева Н.В.	76, 113, 121	Макаров А.В.	94, 111
Ким О.К.	142	Макарова А.О.	62
Кириченко В.Г.	58	Малицкая М.А.	118, 119
Киселева Т.Ю.	82, 152	Мамаев А.С.	94
Китаев В.В.	36, 62	Манакова И.А.	91, 92, 142
Клейнерман Н.М.	41, 63	Мартыненко С.С.	175
Козеренко С.В.	161	Матухин В.Л.	69
Козин М.Г.	166, 167	Мацнев М.Е.	31, 44, 52, 64, 173
Козлов К.А.	94, 98, 111, 121	Медведева Т.М.	114
Козловский А.Л.	82	Медвецкая И.Ю.	152, 161
Колодкин Д.А.	100	Межуев Е.М.	144
Комашко Л.В.	142	Менушенков В.П.	114, 117
Коннычев М.А.	127	Мищенко И.Н.	40, 77
Конов А.Б.	128	Морозов В.В.	80, 160
Коньгин Г.Н.	128	Мубаракшин Ш.И.	148
Коровушкин В.В.	71, 114	Мурин И.В.	132
Королев Д.В.	132	Мухамедшин И.Р.	70
Короленко М.В.	134, 138	Мушников Н.В.	63
Коротков В.В.	81	<b>Н</b>	
Коршунов Л.Г.	76, 87	Назипов Р.А.	174
Костишин В.Г.	71	Наумов С.П.	63
Кошелец В.П.	166	Немцова О.М.	100

Никитин М.П.	129	Русаков В.С.	31, 37, 44, 52, 64, 65, 82, 101, 107, 152, 156, 158, 161, 162, 173
Новакова А.А.	51, 131	Рыбин Д.С.	128
Носков А.И.	90	<b>С</b>	
Нургалиев Д.К.	145	Савченко А.Г.	114, 117
<b>О</b>		Сагарадзе В.В.	98, 111, 113, 121
Озерной А.Н.	91, 92	Садыков Э.К.	148, 150, 151
Онищенко Я.В.	145	Саломасов В.А.	154
Оштрах М.И.	154	Сарычев А.Д.	176
<b>П</b>		Сарычев Д.А.	112, 118, 119, 176
Панкина Г.В.	103	Седых В.Д.	33
Панкратов Д.А.	44, 50, 157	Седьмов Н.А.	80, 160
Панченко В.Я.	77, 129	Семенов В.Г.	66, 132, 171
Панчук В.В.	66, 132, 171	Сериков В.В.	41, 63
Пермяков Ю.В.	154	Сивков А.А.	105
Перунов И.В.	81	Сигов А.С.	31, 36, 37, 52, 62, 64, 65
Перфильев Ю.Д.	47, 103, 124, 126, 127, 135, 136, 141, 168, 169	Скундин А.М.	101, 107
Петров В.И.	116, 175	Смирнова Е.С.	39
Петров Г.И.	150	Соболев А.В.	44, 45, 50, 60, 61, 68
Петухов В.Ю.	128	Сопина Ю.В.	69
Печникова Н.А.	132	Сташенко В.В.	112, 118, 119, 176
Пилюгин В.П.	98	Степанов С.В.	47, 126
Пилягин М.В.	140	Степович М.А.	71
Погорельцев А.И.	69	Столяр С.В.	120, 123
Покатилов В.С.	31, 36, 37, 52, 62, 64, 65	Сульянов С.Н.	81
Поликарпов Д.М.	129	Суриков В.Т.	99
Поликарпов М.А.	40, 77	Сысоева М.А.	133
Попов А.Г.	41	<b>Т</b>	
Порсев В.Е.	100	Тагиров Л.Р.	79, 140
Похолок К.В.	137	Тамбиев А.Х.	127
Пресняков И.А.	44, 45, 50, 60, 61, 68	Таскаев С.В.	159
Протасов А.В.	99	Титов В.В.	112
Пчелина Д.И.	152, 162	Тлеубергенов Ж.К.	91, 92
Пятаев А.В.	83, 106, 109, 133, 145, 163, 164	Торопова Я.Г.	132
<b>Р</b>		Троян И.А.	34
Раевская С.И.	112, 118, 119	Тугарова А.В.	124, 143
Раевский И.П.	112, 118, 119	Тябликов О.А.	137
Рафальский А.И.	117	<b>У</b>	
Родионов И.Д.	156	Ульянов А.И.	104
Розова М.Г.	137	Ульянов А.Л.	100, 104, 139
Ромашкина И.Л.	166, 167	Уразлина Л.Н.	133
Ружье А.	134	<b>Ф</b>	
		Фабричный П.Б.	134, 138, 144

Фадеев М.С.	82	<b>A</b>	
Файзрахманов И.А.	90	Abdel-Latif I.A.	49
Феклистов Д.Ю.	154	Abdullin A.F.	83
Филимонов Д.С.	137	Afanas'ev S.V.	76
Филиппенко Л.В.	166	Afanasov M.I.	134, 138, 144
Филиппов В.П.	116, 122, 154, 169, 175	Afonin M.V.	132
Фролов К.В.	39, 81	Akhmedzhanov I.D.	133
<b>X</b>		Akhmetov M.M.	128
Хабибрахманова В.Р.	133	Aksenov S.N.	149
Хайбуллин Р.И.	88, 89, 90	Akulenko A.A.	50
Хасанов А.М.	122	Alekseeva O.A.	39
Хасанов Р.Н.	70	Aliyev M.	32
Хмеленин Д.Н.	81	Andreeva M.A.	146
<b>Ч</b>		Antonova A.V.	152, 156, 158
Черепанов В.М.	40, 77, 129	Anuchina M.M.	157
Чернавский П.А.	103	Arinin V.V.	150, 151
Чистякова Н.И.	152, 156, 158, 161, 162	Artemov V.V.	81
Чуев М.А.	30, 40, 77, 81, 129, 169	Arzhnikov A.K.	73, 110
Чулкина А.А.	104	Astashkin R.A.	138
Чумаков А.И.	34, 43	<b>B</b>	
<b>Ш</b>		Babanov Yu.A.	146
Шабашов В.А.	76, 87, 94, 96, 98, 111, 113, 121	Bajnóczy É.G.	102
Шаненков И.И.	105	Bakirov B.A.	172
Шапкин А.А.	152, 156, 158, 162	Baldokhin Yu.V.	136
Шахмуратов Р.Н.	147	Baluyan T.G.	51
Шипко М.Н.	71	Barinov V.A.	99
Школьников Е.Н.	80, 160	Baskakov A.O.	84
Шмидт Е.В.	69	Batalov R.I.	115
Шмидт С.В.	69	Baulin R.A.	146
Шустов В.А.	90, 115	Bayazitov R.M.	115
<b>Щ</b>		Bayukov O.A.	56, 120, 123
Щетинин И.В.	114, 117	Bazarov V.V.	90
<b>Ю</b>		Bedin S.A.	81
Юрениа А.Ю.	77	Belik A.A.	31, 45, 52, 60, 61, 64, 65, 67, 68
Юричук А.А.	148, 151	Bezmaternykh L.N.	39, 56
<b>Я</b>		Bogdán Cs.	102
Ярославцев А.Б.	101, 107	Bokov A.V.	169
Ярославцев Р.Н.	120, 123	Boltakova N.V.	106
Ярославцев С.А.	64, 101, 107	Bordyuzhin I.G.	114
Яскевич В.И.	142	Brodskii A.R.	142
		Burkhanov G.S.	48
		Byakov V.M.	47, 126
		Bychkov A.Yu.	161

<b>C</b>			
Chou C.-C.	112	Galagudza M.M.	132
Cesnek M.	72	Gapochka A.M.	31, 44, 52
Chen H.	112	Garayev R.R.	133
Cherepanov V.M.	40, 77, 129	Gavriliuk A.G.	34, 95, 149
Chernavskii P.A.	103	Gavrilov N.V.	94
Chistyakova N.I.	73, 152, 156, 158, 161, 162	Gavrilov S.N.	152, 162
Chuev M.A.	30, 40, 77, 81, 129, 169	Gavrilova T.	32
Chukin A.V.	153	Gervits N.E.	78, 86
Chulkina A.A.	104	Gilmutdinov I.F.	70, 88
Chumakov A.I.	34, 43, 73, 95, 146	Glazkova Ya.S.	31, 44, 45, 50, 60, 61, 64, 67, 68
<b>D</b>		Godovikov S.K.	53
Deák L.	102	Goloborodsky B.Yu.	94, 146
Dedushenko S.K.	135, 141, 168	Golovanevskiy V.A.	38, 155
Deminov R.G.	85	Golubov A.A.	85
Devyaterikov D.I.	146	Gostev R.A.	172
Dmitrieva T.V.	78	Gracheva M.A.	152, 158
Dobysheva L.V.	42	Grebenyuk A.V.	171
Dolzhikova A.V.	131	Gruzdev M.S.	83, 109
Domracheva N. E.	83, 109	Gudim I.A.	39
Dorofeev G.A.	97	Gumarov A. I.	88
Douglav A.V.	38	Gumarov G.G.	128
Dulov E.N.	89, 90, 140, 172	Günther A.	32
<b>E</b>		Gusarov V.V.	66
Eremina M.A.	139	Gusev A.A.	112
Esmaeili A.	93	Guseynov M.M.	159
<b>F</b>		<b>H</b>	
Fabritchnyi P.B.	134, 138, 144	Hirazawa H.	108
Fadeev M.C.	82	<b>I</b>	
Faizrakhmanov I.A.	90	Ikal Ali Kadim	110
Feklistov D. Yu	154	Ilyushin A.S.	108
Filimonov D.S.	137	Irkaev S.M.	66, 171
Filipova I.	32	Iskhakov R.S.	120, 123
Filippenko L.V.	166	Isupov V.P.	112
Filippov V.P.	116, 122, 154, 169, 175	Ivanova A.G.	149
Fominov Ya.V.	85	Ivanova A.G.	73, 109, 145, 163, 164
Frolov K.V.	39, 81	Ivashutenko A.S.	105
<b>G</b>		<b>J</b>	
Gabbasov R.R.	77, 129	Joshi R.	49
Gaifullin R.R.	85	<b>K</b>	
Gainov R.R.	38, 155	Kabanov V.M.	54, 108
		Kadyrzhanov K.K.	82
		Kamilov I.K.	159
		Kamnev A.A.	124, 143
		Kamzin A.S.	79, 125, 130

Karen P.	35	<b>L</b>	
Karminskaya T.Yu.	85	Labrugère C.	134
Kasanova E.	159	Ladygina V.P.	120
Kataeva N.V.	76, 113, 121	Laguntsov N.I.	154
Kazak N.V.	56	Lai Chih-Huang	93
Khabibrakhmanova V.R.	133	Lančok A.	72, 74
Khaibullin R. I.	88, 89, 90	Latypova R.I.	89
Khasanov A.M.	122	Lekina Yu.	60, 61
Khasanov R.N.	70	Levin D.M.	168
Khassanov R.R.	38, 155	Li Ya.	46
Khmelenin D.N.	81	Lin C.-R.	78, 84, 86
Kiiamov A.G.	32, 55	Lin Hsiu-Hau	93
Kim O.K.	142	Lindén Johan K. M.	35
Kirichenko V.G.	58, 59	Lindroos F.J.	35
Kiseleva T.Yu.	54, 82, 108, 152	Litvinov A.V.	76, 111, 113, 121
Kitaev V.V.	36, 62	Loginova N.A.	129
Kleinerman N.M.	41, 63	Loidl A.	32, 55
Knyazev Yu.V.	56	Lomanova N.A.	66
Kolodkin D.A.	100	Lomayeva S.F.	139
Komashko L.V.	142	Loseva E.V.	129
Konnychev M.A.	127	Lubnin A.N.	97
Konov A.B.	128	Luk'yanova E.N.	52, 82
Konygin G.N.	128	Lyadov N.M.	90
Korolenko M.V.	134, 138	Lyashkov K.A.	98, 113
Korolev D.V.	132	Lysogorskiy Y.V.	55, 57
Korolyov A.V.	110	Lyubutin I.S.	34, 39, 78, 81, 84, 86, 95, 149
Korotkov V.V.	81		
Korovushkin V.V.	71, 114	<b>M</b>	
Korshunov L.G.	76, 87	Makarov A.V.	94, 111
Koshelets V.P.	166	Makarova A.O.	62
Kostishin V.G.	71	Makhaev V.D.	46
Kovalenko O.V.	59	Maksimova A.A.	153
Kozerenko S.V.	161	Malitskaya M.A.	118, 119
Kozin M.G.	166, 167	Mamaev A.S.	94
Kozlov K.A.	94, 98, 111, 121	Manakova I.A.	91, 92, 142
Kozlovskiy A.L.	82	Markov G.P.	54
Krivenko S.A.	57	Martynenko S.S.	175
Krug von Nidda H.-A.	32	Matsnev M.E.	31, 44, 52, 64, 173
Kubrin S.P.	112, 118, 119	Matukhin V.L.	69
Kulakov K.V.	52	Medvedeva T.M.	114
Kulikov L.A.	47, 124, 126, 136	Medvetskaya I.Yu.	152, 161
Kulova T.L.	101, 107	Menushenkov V.P.	114, 117
Kupriyanov M.Yu.	85	Mezhuev E.M.	144
Kurchatov I.M.	154	Mischenko I.N.	40, 77
		Morozov V.V.	80, 160

Mubarakshin Sh.I.	148	Pilyagin M.V.	140
Mukhamedshin I.R.	70	Platunov M.S.	56
Mukhgalin V.V.	97	Pogoreltsev A.I.	69
Murin I.V.	132	Pokatilov V.S.	31, 36, 37, 52, 62, 64, 65
Mushnikov N.V.	63	Pokholok K.V.	137
<b>N</b>		Polikarpov D.M.	129
Nagy D.L.	102	Polikarpov M.A.	40, 77
Narang B.S.	49	Ponomarev D.A.	146
Naumov P.G.	95	Popov A.G.	41
Naumov S.P.	63	Popov V.V.	75
Nazipov R.A.	115, 130, 174	Porsev V.E.	100
Nedopekin O.V.	57	Presniakov I.A.	44, 45, 50, 60, 61, 67, 68
Németh Z.	102	Prokes K.	38
Nemkovskii K.	38	Protasov A.V.	99
Nemtsova O.M.	100	Pyataev A. V.	73, 83, 106, 109, 115, 133, 145, 163, 164
Nikiforova Yu.A.	95, 149	<b>R</b>	
Nikitin M.P.	129	Raevskaya S.I.	112, 118, 119
Nikitina Z.K.	46	Raevski I.P.	112, 118, 119
Noskov A.I.	90	Rafalsky A.I.	117
Novakova A.A.	51, 54, 131	Rodionov I.D.	156
Nurgaliev D.K.	145	Romashev L.N.	146
<b>O</b>		Romashkina I.L.	166, 167
Onishchenko Y.V.	145	Rougier A.	134
Oshtrakh M.I.	153, 154, 170	Rozova M.G.	137
Ovanesyan N.S.	46, 67	Rüffer R	34, 95, 146
Ovchinnikov S.G.	56	Rusakov V.S.	31, 37, 44, 52, 64, 65, 82, 101, 107, 108, 152, 156, 158, 161, 162, 173
Ozernoy A.N.	91, 92	Russina M.	38
<b>P</b>		Rybin D.S.	128
Panchenko V.Y.	77, 129	<b>S</b>	
Panchuk V.V.	66, 132, 171	Sadykov E.K.	148, 150, 151
Pankina G.V.	103	Sagaradze V.V.	98, 111, 113, 121
Pankratov D.A.	44, 50, 157	Salomasov V.A.	154
Pápai M.	102	Sangaa D.	108
Pchelina D.I.	152, 162	Sarychev A.D.	176
Pechnikova N.A.	132	Sarychev D.A.	112, 118, 119, 176
Pen'kov I.N.	155	Savchenko A.G.	114, 117
Perfiliev Yu. D.	47, 103, 124, 126, 127, 135, 136, 141, 168, 169	Schmidt E.V.	69
Permyakov Yu.V.	154	Schmidt S.V.	69
Perunov I.V.	81	Sed'mov N.A.	80, 160
Petrov G.I.	150	Sedykh V.D.	33
Petrov V.I.	116, 175		
Petukhov V.Yu.	128		
Piliugin V.P.	98		



Seidov Z.	32	Troyan I.A.	34, 95, 149
Semenov V.G.	66, 132, 171	Tsurkan V.	32, 55
Semionkin V.A.	153, 170	Tugarova A.V.	124, 143
Sergeev A.V.	75	Tyablikov O.A.	137
Serikov V.V.	41, 63	<b>U</b>	
Shabashov V.A.	76, 87, 94, 96, 98, 111, 113, 121	Ul'yanov A.I.	104
Shakhmurov R.N.	147, 165	Ul'yanov A.L.	97, 100, 104, 139
Shanenkov I.I.	105	Urazlina L.N.	133
Shapkin A.A.	152, 156, 158, 162	Useinov A.N.	93
Shchetinin I.V.	114, 117	Useinov N.K.	93
Shih K.-Ya.	84	Ustinov V.V.	146
Shilov G.V.	46	<b>V</b>	
Shipko M.N.	71	Vagizov F. G.	32, 38, 55, 70, 88, 90, 147, 148, 155, 165
Shkolnikov E.N.	80, 160	Vakhin A.V.	145
Shustov V.A.	90, 115	Vakhitov I.R.	140
Sigov A.S.	31, 36, 37, 52, 62, 64, 65	Valeev V. F.	88
Singh C.	49	Valiulina S.I.	163, 164
Singh J.	49	Valiullin A.A.	79
Sivkov A.A.	105	Vankó G.	102
Skundin A.M.	101, 107	Vereshchak M.F.	91, 92
Smirnov G.V.	146	Verin I.A.	39
Smirnova E.S.	39	Vershinin A.V.	63
Sobolev A.V.	44, 45, 50, 60, 61, 67, 68	Vlasova N.I.	41
Solovyov L.A.	56	Volfova L.	72
Sopina Yu.V.	69	Volkova L.D.	142
Starchikov S.S.	78, 84, 86, 95, 149	Vorobyeva N.A.	157
Stashenko V.V.	112, 118, 119, 176	Voronina E.V.	73, 110, 145, 163, 164
Stepanov S.V.	47, 126	Vostrov N.I.	101, 107
Stepovich M.A.	71	Vyzhimov Yu.M.	174
Stolbovsky A.V.	75	<b>W</b>	
Stolyar S.V.	120, 123	Wattiaux A.	144
Struzhkin V.V.	95	Wei Yi.	61, 68
Sulyanov S.N.	81, 149	<b>Y</b>	
Surikov T.S.	99	Yaroslavtsev A.B.	101, 107
Sysoeva M.A.	133	Yaroslavtsev R.N.	120, 123
<b>T</b>		Yaroslavtsev S.A.	64, 101, 107
Tagirov L.R.	32, 55, 79, 85, 140	Yaskevich V.I.	142
Tambiev A.Kh.	127	Yelsukov E.P.	100, 104, 110, 139
Taskaev S.V.	159	Yokaichiya F.	38
Tayurskii D.A.	55, 57	Yurenaya A.Y.	77
Titov V.V.	112	Yurichuk A.A.	148, 151
Tleubergenov Zh.K.	91, 92	<b>Z</b>	
Tropova Ya.G.	132	Zagainov A.V.	100
		Zagorsky D.L.	81

Zakarina N.A.	142
Zaki H. M.	49
Zalutskii A.A.	80, 160
Zamatovsky A.E.	87, 98, 111, 113
Zavalishin V.A.	76
Zavarzina D.G.	152, 156, 158, 162
Zdorovets M.V.	82
Zhilina T.N.	152, 156, 158
Zholudev S.I.	54
Zinnatullin A. L.	88
Zyuzin N.A.	174

## СОДЕРЖАНИЕ

	<b>Программа конференции</b>	<b>6</b>
	<b>Секция I. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме</b>	
<b>I I-1</b>	<i>Чуев М.А.</i> Спектр возбуждений и магнитная динамика неелевского ансамбля антиферромагнитных наночастиц в мёссбауэровской спектроскопии .....	<b>30</b>
<b>I I-2</b>	<i>Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Мацнев М.Е., Гапочка А.М., Глазкова Я.С.</i> Пространственная спин-модулированная структура и сверхтонкие взаимодействия ядер $^{57}\text{Fe}$ в мультиферроиках $\text{BiFeO}_3$ и $\text{BiFe}_{1-x}\text{T}_x\text{O}_3$ ( $T = \text{Sc, Cr, Mn}$ ).....	<b>31</b>
<b>O I-3</b>	<i>Seidov Z., Krug von Nidda H.-A., Tsurkan V., Filipova I., Günther A., Aliyev M., Vagizov F., Kiiamov A., Tagirov L., Gavrilova T., Loidl A.</i> Magnetic properties of the chain antiferromagnet $\text{RbFeSe}_2$ .....	<b>32</b>
<b>O I-4</b>	<i>Седых В.Д.</i> Аномальные особенности структурных превращений в слабо легированном барием манганите лантана и их корреляция с физическими свойствами.....	<b>33</b>
<b>O I-5</b>	<i>Троян И.А., Гаврилюк А.Г., Rüffer R., Чумаков А.И., Любутин И.С.</i> Наблюдение сверхпроводимости в сероводороде с помощью эффекта Мёссбауэра при высоких давлениях.....	<b>34</b>
<b>O I-6</b>	<i>Lindén Johan K. M., Karen P., Lindroos F.J.</i> Valence mixing and charge ordering in the $\text{RBaFe}_2\text{O}_5$ double perovskite ( $R = \text{Y, Gd, Tb or Ho}$ ).....	<b>35</b>
<b>I I-7</b>	<i>Покатилов В.С., Сигов А.С., Кутаев В.В.</i> Исследование аморфных сплавов $\text{Fe}_{85-x}\text{Cr}_x\text{B}_{15}$ ( $x = 0 - 20$ ) методом ЯМР на ядрах $^{11}\text{B}$ и эффекта Мёссбауэра на ядрах $^{57}\text{Fe}$ .....	<b>36</b>
<b>O I-8</b>	<i>Покатилов В.С., Русаков В.С., Сигов А.С.</i> Особенности ЯМР спектроскопии на ядрах $^{57}\text{Fe}$ в мультиферроике $\text{BiFeO}_3$ .....	<b>37</b>
<b>O I-9</b>	<i>Gainov R.R., Golovanevskiy V.A., Vagizov F.G., Khassanov R.R., Douglav A.V.I, Nemkovskii K., Prokes K., Yokaichiya F., Russina M.</i> Zero-field NMR, Mössbauer effect and neutron diffraction in $\text{CuFeS}_2$ .....	<b>38</b>
<b>O I-10</b>	<i>Фролов К.В., Любутин И.С., Смирнова Е.С., Алексеева О.А., Верин И.А., Безматерных Л.Н., Гудим И.А.</i> Низкотемпературные мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования ферроборатов $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ( $R = \text{Y, Nd, Sm, Gd}$ ).....	<b>39</b>
<b>O I-11</b>	<i>Мищенко И.Н., Чуев М.А., Черепанов В.М., Поликарпов М.А.</i> Квантовая модель магнитной динамики однодоменных частиц для описания их кривых намагничивания и мёссбауэровских спектров в слабом магнитном поле.....	<b>40</b>
<b>O I-12</b>	<i>Клейнерман Н.М., Сериков В.В., Власова Н.И., Попов А.Г.</i> Исследование особенностей формирования структуры упорядочивающегося сплава $\text{FePd}$ .....	<b>41</b>
<b>O I-13</b>	<i>Dobysheva L.V.</i> First-principles calculations of alloyed cementite $(\text{Fe-Ni})_3\text{C}$ .....	<b>42</b>
<b>I I-14</b>	<i>Чумаков А.И.</i> Обзор работ по ядерному резонансному рассеянию на ESRF.....	<b>43</b>

<b>I I-15</b>	<i>Соболев А.В., Русаков В.С., Гапочка А.В., Глазкова Я.С., Мацнев М.В., Панкратов Д.А., Пресняков И.А.</i> Мёссбауэровское исследование модулированной магнитной структуры FeVO <sub>4</sub> .....	<b>44</b>
<b>O I-16</b>	<i>Глазкова Я.С., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А.</i> Мёссбауэровское исследование структурных модуляций в манганитах AMn <sub>7</sub> O <sub>12</sub> (A = Ca, Sr, Cd, Pb).....	<b>45</b>
<b>O I-17</b>	<i>Ovanesyan N.S., Nikitina Z.K., Shilov G.V., Makhaev V.D., Li Ya.</i> Localized and itinerant electron ferromagnetism in two-dimensional organo-metallic networks.....	<b>46</b>
<b>O I-18</b>	<i>Степанов С.В., Бяков В.М., Перфильев Ю.Д., Куликов Л.А.</i> Локальный нагрев среды в нанокрестности ядра <sup>57</sup> Co, превратившегося в ядро <sup>57</sup> Fe в результате процесса Е-захвата.....	<b>47</b>
<b>O I-19</b>	<i>Бурханов Г.С.</i> Возможности применения Мёссбауэровской спектроскопии в материаловедческих исследованиях.....	<b>48</b>
<b>P I-1</b>	<i>Singh C., Zaki H. M., Abdel-Latif I. A., Singh J., Bindra Narang S., Joshi R.</i> Structural, magnetic properties and Mössbauer spectra of Ba <sub>0.5</sub> Sr <sub>0.5</sub> Co <sub>x</sub> Al <sub>x</sub> Fe <sub>12-2x</sub> O <sub>19</sub> (x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1).....	<b>49</b>
<b>P I-2</b>	<i>Акуленко А.А., Соболев А.В., Панкратов Д.А., Глазкова Я.С., Пресняков И.А.</i> Мёссбауэровское исследование локальных кристаллографической и магнитной структур оксофосфата железа (III) Fe <sub>3</sub> PO <sub>7</sub> .....	<b>50</b>
<b>P I-3</b>	<i>Балуян Т.Г., Новакова А.А.</i> Исследование магнитных фазовых превращений в частицах селенида железа, полученных методом высокотемпературной твердофазной реакции.....	<b>51</b>
<b>P I-4</b>	<i>Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Мацнев М.Е., Гапочка А.М., Кулаков К.В., Лукьянова Е.Н.</i> Температурные исследования мультиферроика BiFe <sub>0.90</sub> Mn <sub>0.10</sub> O <sub>3</sub> методами мёссбауэровской спектроскопии.....	<b>52</b>
<b>P I-5</b>	<u>Годовиков С.К.</u> Парамагнитная магнитострикция в тербии.....	<b>53</b>
<b>P I-6</b>	<i>Kiseleva T.Yu., Kabanov V.M., Zholudev S.I., Novakova A.A., Markov G.P.</i> Mössbauer study of polymer composites with spatially oriented ferromagnetic particles of different composition and shape.....	<b>54</b>
<b>P I-7</b>	<i>Kiiamov A.G., Vagizov F.G., Tagirov L.R., Lysogorskiy Y.V., Tsurkan V., Loidl A., Taurskii D. A.</i> Low temperature Mössbauer study of Fe <sub>1.05</sub> Te.....	<b>55</b>
<b>P I-8</b>	<i>Кнуязев Ю.В., Казак Н.В., Байуков О.А., Безматерных Л.Н., Соловьев Л.А., Платунов М.С., Овчинников С.Г.</i> Study of cation distribution in single crystals Mn <sub>2-x</sub> Fe <sub>x</sub> BO <sub>4</sub> (x = 0.34, 0.53, 0.72) through Mössbauer spectroscopy.....	<b>56</b>
<b>P I-9</b>	<i>Lysogorskiy Y.V., Krivenko S.A., Nedopekin O.V. and Tayurskii D.A.</i> Ab-initio study of electronic correlations and disproportionation in the x=2/3 phase of sodium cobaltates.....	<b>57</b>
<b>P I-10</b>	<i>Кириченко В.Г.</i> Мёссбауэровская спектроскопия включений интерметаллидов в циркониевых сплавах.....	<b>58</b>
<b>P I-11</b>	<i>Kirichenko V.G., Kovalenko O.V.</i> Structure of surface nanolayers of yttrium iron garnet films.....	<b>59</b>
<b>P I-12</b>	<i>Лекина Ю.О., Глазкова Я.С., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А.</i> Исследование локальной структуры BiNiO <sub>3</sub> методом зондовой мёссбауэровской спектроскопии на ядрах.....	<b>60</b>
<b>P I-13</b>	<i>Лекина Ю.О., Глазкова Я.С., Вей И., Белик А.А., Соболев А.В., Пресняков И.А.</i>	

	Исследование хромитов $R\text{CrO}_3$ ( $R = \text{Ti}, \text{Bi}$ ) со структурой перовскита методом зондовой мёссбауэровской спектроскопии на ядрах $^{57}\text{Fe}$ .....	61
<b>P I-14</b>	<i>Макарова А.О., Покатилов В.С., Сигов А.С., Китаев В.В.</i> Локальные структурные состояния примесных атомов железа в перовскитах $\text{La}_{1-x}\text{Co}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$ ( $x = 0 - 0.50$ ).....	62
<b>P I-15</b>	<i>Наумов С.П., Вершинин А.В., Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В.</i> Мёссбауэровское исследование магнитного фазового перехода в соединении $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Si}_{0.07})_2$ .....	63
<b>P I-16</b>	<i>Покатилов В.С., Русаков В.С., Сигов А.С., Белик А.А., Глазкова Я.С., Мацнев М.Е., Ярославцев С.А.</i> Мёссбауэровские исследования мультиферроиков $\text{BiFeO}_3$ допированных хромом: $\text{BiFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ( $x = 0.0 - 0.30$ ).....	64
<b>P I-17</b>	<i>Русаков В.С., Покатилов В.С., Сигов А.С., Белик А.А.</i> Температурные исследования пространственной спин-модулированной структуры мультиферроика $\text{BiFe}_{0.95}\text{Cr}_{0.05}\text{O}_3$ методами мёссбауэровской спектроскопии.....	65
<b>P I-18</b>	<i>Панчук В.В., Ломанова Н.А., Семенов В.Г., Гусаров В.В., Иркаев С.М.</i> Распределение атомов железа в фазах Ауривиллиуса по данным спектроскопии ЯГР.....	66
<b>P I-19</b>	<i>Sobolev A.V., Belik A.A., Glazkova Y.S., Ovanesyanyan N.S., Presniakov I.A.</i> Local crystal and magnetic structure of $\text{Ag}_2\text{FeO}_2$ and $\text{Ag}_2\text{Ga}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_2$ : a $^{57}\text{Fe}$ Mössbauer study.....	67
<b>P I-20</b>	<i>Соболев А.В., И. Вэй, Пресняков И.А., Глазкова Я.С., Белик А.А.</i> Мёссбауэровское исследование распределения катионов в кобальтитах-ферритах $\text{ScCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ .....	68
<b>P I-21</b>	<i>Сопина Ю.В., Погорельцев А.И., Шмидт С.В., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.</i> Особенности распределения спиновой плотности в $\text{CuFeS}_2$ по данным ЯМР $^{63,65}\text{Cu}$ в локальном поле.....	69
<b>P I-22</b>	<i>Хасанов Р.Н., Гильмутдинов И.Ф., Вагизов Ф.Г., Мухамедшин И.Р.</i> Исследование магнитных свойств натриевых кобальтатов, допированных ионами железа	70
<b>P I-23</b>	<i>Шипко М.Н., Коровушкин В.В., Степович М.А., Костишин В.Г.</i> Мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования соединений в системе $\text{BaO-Fe}_2\text{O}_3$ .....	71
<b>P I-24</b>	<i>Volfova L., Cesnek M., Lančok A.</i> Study of nanocrystallized NANOPERM-type metallic glass.....	72
<b>P I-25</b>	<i>Voronina E.V., Chistyakova N.I., Pyataev A.V., Chumakov A.I., Ivanova A.G., Arzhnikov A.K.</i> Magnetic phase separation in systems with long-period magnetic structures exploring by Mössbauer spectroscopy.....	73
<b>Секция II. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры</b>		
<b>I II-1</b>	<i>Lančok A.</i> Mössbauer spectroscopy of iron-containing nanoparticles in different types of materials.....	74
<b>I II-2</b>	<i>Popov V.V., Sergeev A.V., Stolbovsky A.V.</i> Mössbauer spectroscopy of grain boundaries in ultrafine-grained materials processed by severe plastic deformation.....	75
<b>O II-3</b>	<i>Литвинов А.В., Шабашов В.А., Завалишин В.А., Афанасьев С.В., Коршунов Л.Г., Катаева Н.В.</i> Структурно-фазовые переходы при мегапластической деформации азотированной нержавеющей стали.....	76
<b>O II-4</b>	<i>Черепанов В.М., Габбасов Р.Р., Мищенко И.Н., Поликарпов М.А., Чуев</i>	

*М.А., Юрени А.Ю., Панченко В.Я.*

	Синтез и мёссбауэровское исследование наночастиц магнетита в водных коллоидах, предназначенных для струйной печати.....	77
<b>О II-5</b>	<i>Starchikov S.S., Gervits N.E., Lin C.-R., Dmitrieva T.V., Lyubutin I.S.</i> Structural, magnetic and electronic properties of $Fe_{1+x}Ga_{2-x}O_4$ nanoparticles studied by Mössbauer and Raman spectroscopy.....	78
<b>О II-6</b>	<i>Валиуллин А.А., Камзин А.С., Тагиров. Л.Р.</i> Исследования магнитных пленок для сверхвысокоплотной записи информации.....	79
<b>О II-7</b>	<i>Залуцкий А.А., Седьмов Н.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.</i> Исследование динамических и фазовых переходов в системе «железо-пленки воды-поверхность наноглин».....	80
<b>О II-8</b>	<i>Перунов И.В., Фролов К.В., Коротков В.В., Бедин С.А., Загорский Д.Л., Любутин И.С., Хмеленин Д.Н., Артёмов В.В., Сульянов С.Н., Чуев М.А.</i> Фазовый состав и магнитные свойства Fe-Co и Fe-Ni нанопроволок, полученных в порах трековых мембран.....	81
<b>О II-9</b>	<i>Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Козловский А.Л., Киселева Т.Ю., Здоровец М.В., Фадеев М.С., Лукьянова Е.Н.</i> Исследование Fe и Fe-Co нанотрубок в полимерных ионно-трековых мембранах.....	82
<b>Р II-1</b>	<i>Абдуллин А.Ф., Пятаев А.В., Домрачева Н.Е., Груздев М.С.</i> Мёссбауэровское исследование поверхности наночастиц core-shell типа	83
<b>Р II-2</b>	<i>Baskakov A.O., Starchikov S.S., Shih K.-Ya., Lin C.-R., Lyubutin I.S.</i> Mössbauer and Raman spectroscopy study of graphene - magnetite nanocomposites.....	84
<b>Р II-3</b>	<i>Gaifullin R.R., Deminov R.G., Tagirov L.R., Karminskaya T.Yu., Kupriyanov M.Yu., Fominov Ya.V. and Golubov A.A.</i> Distribution of condensate functions in superconducting triplet spin-valve switching modes.....	85
<b>Р II-4</b>	<i>Gervits N.E., Starchikov S.S., Lin C.-R., Lyubutin I.S.</i> Magnetic, structural and electronic properties of $FeGa_2O_4$ - $FeGaO_3$ nanocomposites.....	86
<b>Р II-5</b>	<i>Заматовский А.Е., Шабашов В.А., Коршунов Л.Г.</i> Мёссбауэровский анализ структуры в области контактного нагружения высокоазотистой хромо-марганцевой аустенитной стали.....	87
<b>Р II-6</b>	<i>Зиннатуллин А.Л., Гумаров А.И., Гильмутдинов И.Ф., Валеев В.Ф., Хайбуллин Р.И., Вагизов Ф.Г.</i> Мёссбауэровские исследования магнитных свойств тонких пленок оксида цинка, имплантированных ионами железа.....	88
<b>Р II-7</b>	<i>Латыпова Р.И., Дулов Е.Н., Хайбуллин Р.И.</i> Микроструктура и магнитные свойства пленок титаната стронция, имплантированного железом.....	89
<b>Р II-8</b>	<i>Лядов Н.М., Базаров В.В., Вагизов Ф.Г., Шустов В.А., Дулов Е.Н., Носков А.И., Хайбуллин Р.И., Файзрахманов И.А.</i> Анализ структуры и магнитно-фазового состава плёнок $^{57}Fe$ , сформированных по технологии ионно-стимулированного осаждения...	90
<b>Р II-9</b>	<i>Озерной А.Н., Верещак М.Ф., Манакова И.А., Тлеубергенов Ж.К.</i> Исследование состояния имплантированных атомов $^{57}Fe$ в металлических матрицах.....	91
<b>Р II-10</b>	<i>Тлеубергенов Ж.К., Манакова И.А., Озерной А.Н., Верещак М.Ф.</i> Конверсионная электронная мёссбауэровская спектроскопия металлических наноконкомпозитов.....	92
<b>Р II-11</b>	<i>Useinov A., Esmaeili A., Lai Chih-Huang, Useinov N., Lin Hsiu-Hau</i> Tunnel magnetoresistance related with nanoparticle size distribution in	

	magnetic tunnel junctions.....	93
<b>P II-12</b>	<i>Голобородский Б.Ю., Шабашов В.А., Макаров А.В., Гаериллов Н.В., Козлов К.А., Мамаев А.С.</i> КЭМС поверхностного слоя аустенитной нержавеющей стали, азотированной в плазме электронного пучка.....	94
<b>Секция III. Перспективные материалы и современные технологии их получения</b>		
<b>I III-1</b>	<i>Lyubutin I.S., Starchikov S.S., Gavriliuk A.G., Troyan I.A., Nikiforova Yu.A., Naumov P.G., Struzhkin V.V., Chumakov A.I., and Rüffer R.</i> High-pressure magnetic and structural transitions in the iron containing langasite multiferroics observed by synchrotron Mössbauer and XRD methods	95
<b>I III-2</b>	<i>Шабашов В.А.</i> Мёссбауэровское исследование атомного перераспределения в специально легированных Fe-Ni сплавах при интенсивных деформационных и радиационных воздействиях.....	96
<b>O III-3</b>	<i>Dorofeev G.A., Lubnin A.N., Ulyanov A.L., Mukhgalin V.V.</i> Accelerated mechanosynthesis of high-nitrogen stainless steel: Mössbauer and X-ray diffraction studies.....	97
<b>O III-4</b>	<i>Козлов К.А., Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Пилюгин В.П., Ляшков К.А., Заматовский А.Е.</i> Деформационно-ускоренное атомное перераспределение в ОЦК Fe-Mn сплавах.....	98
<b>O III-5</b>	<i>Баринов В.А., Протасов А.В., Суриков В.Т.</i> Исследование механосинтезированного $\chi$ -карбида Хегга.....	99
<b>O III-6</b>	<i>Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Порсев В.Е., Колодкин Д.А., Загайнов А.В., Немцова О.М.</i> Мёссбауэровские исследования механического сплавления высококонцентрированных сплавов Fe-Cr.....	100
<b>O III-7</b>	<i>Ярославцев С.А., Востров Н.И., Скундин А.М., Кулова Т.Л., Ярославцев А.Б., Русаков В.С.</i> Локальные состояния атомов железа и сверхтонкие взаимодействия ядер $^{57}\text{Fe}$ в $\text{Li}_x\text{Fe}_{1-y}\text{M}_y\text{PO}_4$ ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ ).....	101
<b>O III-8</b>	<i>Vajnóczy É.G., Bogdán Cs., Deák L., Nagy D.L., Németh Z., Pápai M., Vankó G.</i> Optimizing $\text{Fe}^{2+}$ molecular switches by Mössbauer spectroscopy.....	102
<b>O III-9</b>	<i>Перфильев Ю.Д., Чернавский П.А., Панкина Г.В.</i> Изучение промотированных медью и калием Fe-нанесенных катализаторов методом мессбауэровской спектроскопии.....	103
<b>O III-10</b>	<i>Ульянов А.Л., Ульянов А.И., Чулкина А.А., Елсуков Е.П.</i> Формирование легированного Ni цементита в процессе механохимического синтеза и последующих отжигов.....	104
<b>O III-11</b>	<i>Шаненков И.И., Сивков А.А., Ивашутенко А.С.</i> Плазмодинамический синтез ультрадисперсных магнитомягких материалов в системе «железо-кислород».....	105
<b>P III-1</b>	<i>Болтакова Н.В., Пятаев А.В.</i> Исследование условий образования клинкерных минералов в процессе обжига керамики.....	106
<b>P III-2</b>	<i>Ярославцев С.А., Востров Н.И., Скундин А.М., Кулова Т.Л., Ярославцев А.Б., Русаков В.С.</i> Мёссбауэровские исследования легированных атомами магния литиевых фосфатов железа при деинтеркаляции лития.....	107
<b>P III-3</b>	<i>Илюшин А.С., Киселева Т.Ю., Русаков В.С., Кабанов В.М., Сангаа Д., Хиразова Х.</i> Мёссбауэровское исследование катионного распределения в замещенном	

	магниевома феррите.....	108
<b>P III-4</b>	<i>Иванова А.Г., Пятаев А.В., Домрачева Н.Е., Груздев М.С.</i> Спиновые свойства некоторых комплексов Fe(III).....	109
<b>P III-5</b>	<i>Voronina E.V., Ikal Ali Kadim, [Yelsukov Eu.P.] Arzhnikov A.K., Korolyov A.V.</i> The synthesis of metastable quasi-ordered ternary alloys Fe <sub>65</sub> Al <sub>35-x</sub> Sn <sub>x</sub> (x = 5,10 at.%) with the use of mechanically-alloyed materials as precursors.....	110
<b>P III-6</b>	<i>Козлов К.А., Шабашов В.А., Макаров А.В., Заматовский А.Е., Литвинов А.В., Сагарадзе В.В.</i> Мёссбауэровский анализ структурно-фазовых превращений в высокоазотистой стали 08Х22ГА1.24 при термической обработке и больших пластических деформациях.....	111
<b>P III-7</b>	<i>Кубрин С.П., Раевский И.П., Сташенко В.В., Гусев А. А., Исупов В.П., Н. Chen, С.-С. Chou, Сарычев Д.А., Титов В.В., Раевская С.И.</i> Мёссбауэровское исследование влияния механоактивации на магнитные свойства PbFe <sub>0.5</sub> Nb <sub>0.5</sub> O <sub>3</sub> .....	112
<b>P III-8</b>	<i>Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Литвинов А.В., Заматовский А.Е., Ляшков К.А., Катаева Н.В.</i> Влияние температуры мегапластической деформации на перераспределение углерода и полиморфные фазовые переходы в ГЦК Fe-Ni-C сплавах.....	113
<b>P III-9</b>	<i>Савченко А.Г., Медведева Т.М., Коровушкин В.В., Щетинин И.В., Менушенков В.П., Бордюжин И.Г.</i> Гистерезисные свойства и эффект Мёссбауэра в порошках быстрозакаленного наноконпозиционного сплава (Nd,Zr)-(Fe,Co)-В.....	114
<b>P III-10</b>	<i>Назипов Р.А., Шустов В.А., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Пятаев А.В.</i> Изменение ближнего порядка в аморфном сплаве на основе железа при импульсной ионной модификации.....	115
<b>P III-11</b>	<i>Петров В.И., Филиппов В.П.</i> Контроль распределения железа в реакторном бериллии.....	116
<b>P III-12</b>	<i>Савченко А.Г., Рафальский А.И., Щетинин И.В., Менушенков В.П.</i> Гистерезисные свойства и мёссбауэрская спектороскопия наноконпозитов типа Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> V/α-Fe, синтезированных методом механоактивации.....	117
<b>P III-13</b>	<i>Сташенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И., Малицкая М.А.</i> Степень атомного порядка в Pb <sub>2</sub> FeNbO <sub>6</sub> , допированном Li.....	118
<b>P III-14</b>	<i>Сташенко В.В., Раевский И.П., Кубрин С.П., Сарычев Д.А., Раевская С.И., Малицкая М.А.</i> Мёссбауэровские исследования перовскитов A <sub>2</sub> FeNbO <sub>6</sub> (A = Pb,Ca,Ba,Sr)	119
<b>P III-15</b>	<i>Столяр С.В., Баяков О.А., Исхаков Р.С., Ярославцев Р.Н., Ладыгина В.П.</i> Изменение фазового состава биогенных наночастиц ферригидрита в результате ультразвуковой обработки.....	120
<b>P III-16</b>	<i>Шабашов В.А., Сагарадзе В.В., Козлов К.А., Литвинов А.В., Катаева Н.В.</i> Релаксационные структурно-фазовые превращения в Fe-Ni-Al(Ti) сплавах при мегапластической деформации. Влияние температуры и скорости деформации.....	121
<b>P III-17</b>	<i>Филиппов В.П., Хасанов А.М.</i> Различия в состоянии атомов железа в нано частицах в циркониевых сплавах при малых и больших содержаниях железа.....	122
<b>P III-18</b>	<i>Столяр С.В., Баяков О.А., Исхаков Р.С., Ярославцев Р.Н.</i> Низкотемпературные исследования наночастиц ферригидрита методом мёссбауэровской спектороскопии.....	123
<b>Секция IV. Биологические и медицинские применения</b>		
<b>I IV-1</b>	<i>Камнев А.А., Тугарова А.В., Куликов Л.А., Перфильев Ю.Д.</i> Связывание катионов <sup>57</sup> Co <sup>2+</sup> в активных центрах ферментов: возможности	



	эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии в энзимологии.....	124
<b>O IV-2</b>	<i>Kamzin A.S.</i> Magnetic nanoparticles for “theranostic” biomedical applications.....	125
<b>O IV-3</b>	<i>Бяков В.М., Перфильев Ю.Д., Куликов Л.А., Степанов С.В.</i> О возможности использования эмиссионной мёссбауэровской спектроскопии для выявления химических канцерогенов.....	126
<b>O IV-4</b>	<i>Перфильев Ю.Д., Коннычев М.А., Тамбиев А.Х.</i> Мёссбауэровское изучение цианобактерий <i>Spirulina platensis</i> .....	127
<b>P IV-1</b>	<i>Ахметов М.М., Петухов В.Ю., Гумаров Г.Г., Конов А.Б., Коньгин Г.Н., Рыбин Д.С.</i> <sup>1</sup> H ЯМР исследование раствора лекарственного препарата МАКГ.....	128
<b>P IV-2</b>	<i>Поликарпов Д.М., Габбасов Р.Р., Черепанов В.М., Чуев М.А., Логинова Н.А., Лосева Е.В., Никитин М.П., Панченко В.Я.</i> Перераспределение экзогенного железа между мозгом и селезенкой после введения <sup>57</sup> Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> феррожидкости в мозговой желудочек крысы.....	129
<b>P IV-3</b>	<i>Kamzin A.S., Nazipov R.A.</i> Mössbauer studies of core/shell nanoparticles based on Fe-Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> for biomedical applications.....	130
<b>P IV-4</b>	<i>Новакова А.А., Должикова А.В.</i> Сравнительное мёссбауэровское исследование структурного состояния биогенных и синтезированных наночастиц гетита.....	131
<b>P IV-5</b>	<i>Семенов В.Г., Панчук В.В., Мурин И.В., Королев Д.В., Афонин М.В., Торопова Я.Г., Печникова Н.А., Галагудза М.М.</i> Мёссбауэровские исследования накопления наноразмерных частиц гидроксида железа в организме лабораторных животных.....	132
<b>P IV-6</b>	<i>Уразлина Л.Н., Пятаев А.В., Хабибрахманова В.Р., Гараев Р.Р., Ахмеджанов И.Д., Сысоева М.А.</i> Мёссбауэровское исследование комплексообразования железа с меланином чаги.....	133
<b>Секция V. Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь</b>		
<b>O V-1</b>	<i>Афанасов М.И., Короленко М.В., Фабричный П.Б., Ружье А., Лабрюжер К.</i> Мёссбауэровская спектроскопия зондовых катионов <sup>119</sup> Sn на поверхности кристаллитов ZnO: электронное состояние, локальное окружение и химические реакции примесных добавок олова	134
<b>O V-2</b>	<i>Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д.</i> О некоторых аспектах идентификации степени окисления железа по мёссбауэровским изомерным сдвигам	135
<b>O V-3</b>	<i>Перфильев Ю.Д., Балдохин Ю.В., Куликов Л.А.</i> Изотопный эффект при восстановлении оксида железа водородом	136
<b>O V-4</b>	<i>Похолок К.В., Филимонов Д.С., Розова М.Г., Тябликов О.А.</i> Zn-замещенные ферриты стронция со структурой типа браунмиллерита	137
<b>O V-5</b>	<i>Короленко М.В., Фабричный П.Б., Афанасов М.И., Асташкин Р.А.</i> Применение Мёссбауэровской спектроскопии <sup>121</sup> Sb для разграничения влияния добавок хрома и сурьмы на фотокаталитические свойства порошков анатазной модификации TiO <sub>2</sub>	138
<b>O V-6</b>	<i>Ерёмина М.А., Ломаева С.Ф., Ульянов А.Л., <u>Елсуков Е.П.</u></i> Мёссбауэровская спектроскопия структурно-фазовых превращений при механосплавлении меди и железа в жидкой среде	140
<b>O V-7</b>	<i>Пилягин М.В., Вахитов И.Р., Дулов Е.Н., Тагиров Л.Р.</i> Безокислительная термообработка металлов в воздушной среде	141
<b>P V-1</b>	<i>Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д.</i> О некоторых свойствах комплексных цианидов железа	142

<b>P V-2</b>	<i>Закарина Н.А., Бродский А.Р., Яскевич В.И., Комашко Л.В., Волкова Л.Д., Ким О.К., Манакова И.А.</i> Изучение низкопроцентных платиновых катализаторов изомеризации н-алканов на пилларированных железом монтмориллонитах	<b>143</b>
<b>P V-3</b>	<i>Камнев А.А., Тугарова А.В.</i> Исследование комплекса железа(III) с индолил-3-масляной кислотой методами мёссбауэровской и ИК-спектроскопии	<b>144</b>
<b>P V-4</b>	<i>Межуев Е.М., Афанасов М.И., Ваттио А., Фабричный П.Б.</i> Локальное окружение зондовых ионов $^{119}\text{Sn}^{4+}$ в объеме и на поверхности ортохромита иттрия при гетеровалентных замещениях	<b>145</b>
<b>P V-5</b>	<i>Иванова А.Г., Вахин А.В., Воронина Е.В., Пятаев А.В., Нургалиев Д.К., Онищенко Я.В.</i> Мёссбауэровские исследования продуктов термokatалитического воздействия на керогенсодержащую породу	<b>146</b>

#### **Секция VI. Синхротронное излучение и гамма-оптика**

<b>I VI-1</b>	<i>Andreeva M.A., Baulin R.A., Chumakov A.I., Smirnov G.V., Rüffer R., Babanov Yu.A., Devyaterikov D.I., Goloborodsky B.Yu., Ponomarev D.A., Romashev L.N., Ustinov V.V.</i> Mössbauer reflectivity investigations of $[\text{Fe}/\text{Cr}]_n$ multilayers using synchrotron Mössbauer source.....	<b>147</b>
<b>I VI-2</b>	<i>Вагизов Ф.Г., Шахмуратов Р.Н.</i> Новые приложения эффекта Мёссбауэра.....	<b>148</b>
<b>I VI-3</b>	<i>Садыков Э.К., Юричук А.А., Вагизов Ф.Г., Мубаракишин Ш.И.</i> Мёссбауэровское рассеяние вперед в поле звука: альтернативные схемы эксперимента.....	<b>149</b>
<b>O VI-3</b>	<i>Nikiforova Yu.A., Lyubutin I.S., Gavriiliuk A.G., Starchikov S.S., Sulyanov S.N., Ivanova A.G., Troyan I.A., Aksenov S.N.</i> High pressure study of langasites $\text{Ba}_3\text{MFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ ( $M = \text{Ta}$ and $\text{Nb}$ ) by XRD, Mössbauer and Raman spectroscopy	<b>150</b>
<b>P VI-1</b>	<i>Садыков Э.К., Аринин В.В., Петров Г.И.</i> Мёссбауэровское рассеяние вперед на $\text{FeVO}_3$ в режиме РЧ переключений поля на ядре.....	<b>151</b>
<b>P VI-2</b>	<i>Садыков Э.К., Юричук А.А., Аринин В.В.</i> Эффект толщины в мёссбауэровской спектроскопии в режиме влияния внешних полей: законы сохранения.....	<b>152</b>

#### **Секция VII. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие**

<b>I VII-1</b>	<i>Чистякова Н.И., Шапкин А.А., Антонова А.В. Медвецкая И.Ю. Пчелина Д.И. Грачева М.А., Киселева Т.Ю. Жилина Т.Н., Гаврилов С.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.</i> Биогенные преобразования железосодержащих минералов в щелочных условиях.....	<b>153</b>
<b>O VII-2</b>	<i>Maksimova A.A., Chukin A.V., Semionkin V.A., Oshtrakh M.I.</i> The $\text{Fe}^{2+}$ Occupancies in the silicates M1 and M2 Sites in Chelyabinsk LL5 meteorite determined using XRD and Mössbauer spectroscopy.....	<b>154</b>
<b>O VII-3</b>	<i>Феклистов Д.Ю., Филиппов В.П., Курчатова И.М., Лагунов Н.И., Саломасов В.А., Пермьяков Ю.В., Оштрах М.И.</i> Мёссбауэровские исследования состояния железа в алюмосиликатном реагенте для очистки воды.....	<b>155</b>
<b>O VII-4</b>	<i>Gainov R.R., Khassanov R.R., Vagizov F.G., Golovanevskiy V.A., Pen'kov I.N.</i> Application of X-ray computed tomography, NQR and Mössbauer in studies of fossil wood.....	<b>156</b>
<b>P VII-1</b>	<i>Антонова А.В., Чистякова Н.И., Шапкин А.А., Родионов И.Д., Жилина Т.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.</i>	

	Исследования процессов бактериального восстановления атомов железа в структуре магнетита.....	157
<b>P VII-2</b>	<i>Анучина М.М., Воробьева Н.А., Панкратов Д.А.</i> Термические превращения наноразмерного Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> в присутствии гуминовых веществ.....	158
<b>P VII-3</b>	<i>Чистякова Н.И., Грачева М.А., Антонова А.В., Шапкин А.А., Жилина Т.Н., Заварзина Д.Г., Русаков В.С.</i> Мёссбауэровские исследования процессов восстановления атомов железа в ферригидрите алкалофильной бактерией.....	159
<b>P VII-4</b>	<i>Гусейнов М.М., Таскаев С.В., Камилев И.К., Казанова Э.</i> Исследование фрагментов метеорита «Челябинский» методом ядерной гамма-резонансной спектроскопии.....	160
<b>P VII-5</b>	<i>Седьмов Н.А., Залуцкий А.А., Школьников Е.Н., Морозов В.В.</i> Мёссбауэровская спектроскопия магнитной фракции из глубоководных океанических отложений.....	161
<b>P VII-6</b>	<i>Медвецкая И.Ю., Чистякова Н.И., Бычков А.Ю., Козеренко С.В., Русаков В.С.</i> Мёссбауэровские исследования халькогенидов железа.....	162
<b>P VII-7</b>	<i>Чистякова Н.И., Пчелина Д.И., Шапкин А.А., Заварзина Д.Г., Гаврилов С.Н., Русаков В.С.</i> Мёссбауэровские исследования процессов биогенного восстановления атомов железа в структуре природного глауконита.....	163
<b>P VII-8</b>	<i>Пятаев А.В., Валиулина С.И., Иванова А.Г., Воронина Е.В.</i> Мёссбауэровское исследование глины стыкового соединения бревенчатого сооружения Торецкого поселения.....	163
<b>P VII-9</b>	<i>Valiulina S.I., Pyataev A.V., Ivanova A.G., Voronina E.V.</i> Eastern Europe “triangular” lead-silica glass beads of the 11-early 12th centuries: Mössbauer studies.....	164
<b>Секция VIII. Техника эксперимента и методология</b>		
<b>O VIII-1</b>	<i>Shakhmuratov R.N., Vagizov F.G.</i> New model for acoustically induced Mössbauer sidebands from a single parent line.....	165
<b>O VIII-2</b>	<i>Ромашкина И.Л., Козин М.Г., Кошелев В.П., Филиппенко Л.В.</i> Регистрация спектра излучения мёссбауэровского источника <sup>119m</sup> Sn сверхпроводящими туннельными детекторами.....	166
<b>O VIII-3</b>	<i>Козин М.Г., Ромашкина И.Л.</i> Электронная мёссбауэровская спектроскопия.....	167
<b>O VIII-4</b>	<i>Левин Д.М., Дедушенко С.К., Перфильев Ю.Д.</i> Компьютерная программа для групповой обработки мёссбауэровских спектров «Happy Sloth».....	168
<b>O VIII-5</b>	<i>Боков А.В., Перфильев Ю.Д., Филиппов В.П., Чуев М.А.</i> Метод корректного учёта толщины поглотителя при обработке мёссбауэровских спектров в программе DISCOVER.....	169
<b>O VIII-6</b>	<i>Oshtrakh M.I., Semionkin V.A.</i> Application of Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution: principles, problems and advances.....	170
<b>P VIII-1</b>	<i>Гребенюк А.В., Панчук В.В., Иркаев С.М., Семенов В.Г.</i> Оптимизация мёссбауэровского эксперимента в геометрии на пропускание.....	171
<b>P VIII-2</b>	<i>Гостев Р.А., Бакиров Б.А., Дулов Е.Н.</i> Применение нейросетей в задачах мёссбауэровской спектроскопии.....	172
<b>P VIII-3</b>	<i>Мацнев М.Е., Русаков В.С.</i> Реализация задаваемых пользователем моделей парциальных спектров в	

	программе SpectrRelax.....	173
<b>P VIII-4</b>	<i>Назипов Р.А., Выжимов Ю.М., Зюзин Н.А.</i> Неопределенность измерений и новые правила составления метрологических стандартов для методики калибровки спектрометров Мёссбауэра.....	174
<b>P VIII-5</b>	<i>Петров В.И., Мартыненко С.С., Филиппов В.П.</i> Описание спектров с учетом квадрата лоренциана.....	175
<b>P VIII-6</b>	<i>Сташенко В.В., Сарычев А.Д., Сарычев Д.А.</i> Оптимизация характеристик резонансного детектора $^{57}\text{Fe}$ .....	176

## Мёссбауэровские источники: <sup>57</sup>Co

### Мёссбауэровский резонанс на <sup>57</sup>Fe

Активная часть источника изготавливается путём электролитического осаждения <sup>57</sup>Co высокой чистоты без носителя на металлическую подложку (матрицу) с последующей термодиффузией радионуклида в матрицу. Стандартная матрица — родий. Возможны другие матрицы по специальному заказу.

Тип корпуса мм	D×H, мм	d, мм	Номинальная активность * мКи	Ширина линии, мм/с	МБК	Код
1	11,2×13	8	5	185		MS07.111
			10	370		MS07.112
			25	925	0,11-0,13	MS07.113
			50	1850		MS07.114
			100	3700		MS07.115
2	14×14	8	5	185		MS07.121
			10	370		MS07.122
			25	925	0,11-0,13	MS07.123
			50	1850		MS07.124
			100	3700		MS07.125
6	6×13	4	5	185		MS07.161
			10	370		MS07.162
			25	925	0,11-0,15	MS07.163
			50	1850		MS07.164
			100	3700		MS07.165
9	4×14	1	5	185	0,13-0,15	MS07.191
			10	370		MS07.192
10	6×17	1	5	185	0,13-0,15	MS07.1101
			10	370		MS07.1102

\* — допустимое отклонение -5...+10 %  
 Фактор Мёссбауэра для матрицы: 0,75  
 Выход гамма-квантов с энергией 14,41 кэВ из источника: ≥ 75 %  
 Классификация ISO: C54243  
 Корпус 1, 2, 6: C54243  
 Корпус 9, 10: C34243  
 Диапазон рабочих температур: 4,2 - 700 К \*\*  
 Корпус 1, 2, 6: 4,2 - 700 К \*\*  
 Корпус 9, 10: 220 - 450 К  
 Назначенный срок службы: 10 лет  
 Все источники сертифицируются на аттестованном прецизионном Мёссбауэровском спектрометре. Каждый источник поставляется с протоколом испытаний и указанием параметров измерения при температурах жидкого гелия  
 \*\* — при заказе источника для применения при температурах жидкого гелия требуется дополнительное уведомление

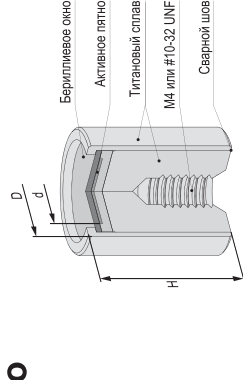
## Мёссбауэровские источники: <sup>119m</sup>Sn

### Мёссбауэровский резонанс на <sup>119m</sup>Sn

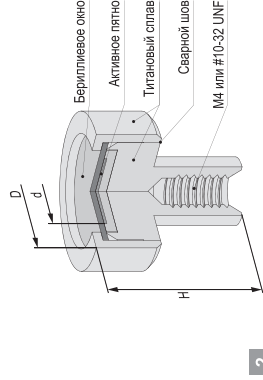
Активная часть источника изготавливается на основе матрицы из стannата кальция [CaSnO<sub>3</sub>], синтезированной с использованием радионуклида <sup>119m</sup>Sn высокой удельной активности (> 300 мКи/г).

Тип корпуса мм	D×H, мм	d, мм	Номинальная активность * мКи	Ширина линии, мм/с	МБК	Код
1	11,2×13	10	2	74		MSn9.211
			5	185	0,38-0,54	MSn9.212
			10	370		MSn9.213
2	14×14	10	2	74		MSn9.221
			5	185	0,38-0,54	MSn9.222
			10	370		MSn9.223
			15	555		MSn9.224
			370		MSn9.233	
3	18×14	15	15	555	0,38-0,45	MSn9.234
			20	740		MSn9.235
6	6×13	5	2	74	0,45-0,54	MSn9.261
			5	185		MSn9.262

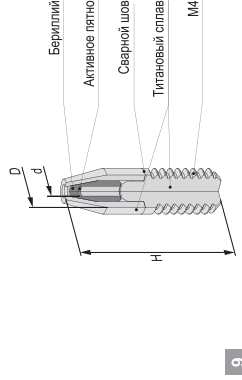
\* — допустимое отклонение -5...+10 %  
 Фактор Мёссбауэра для матрицы: 0,50  
 Выход гамма-квантов с энергией 23,87 кэВ из источника: ≥ 75 %  
 Классификация ISO: C54243  
 Диапазон рабочих температур: 4,2 - 700 К \*\*  
 Назначенный срок службы: 10 лет  
 Все источники сертифицируются на аттестованном прецизионном Мёссбауэровском спектрометре. Каждый источник поставляется с протоколом испытаний и указанием параметров измерения при температурах жидкого гелия  
 \*\* — при заказе источника для применения при температурах жидкого гелия требуется дополнительное уведомление



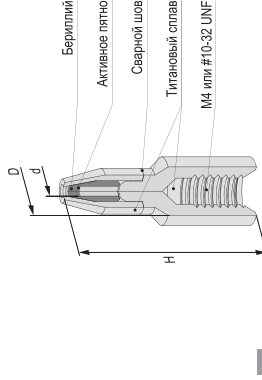
1 6



2



9



10

## Образцовые поглотители

Описание	Толщина, мг <sup>57</sup> Fe/см <sup>2</sup>	Код
<b>С обогащённым железом</b>		
K <sub>2</sub> MgFe(CN) <sub>6</sub>	0,25-1,00	MRA.1.1
FeC <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ×2H <sub>2</sub> O	0,50-1,00	MRA.1.2
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1,00-2,00	MRA.1.3
α-Fe фольга	3 мкм	MRA.1.6
<b>С природным железом</b>		
FeC <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ×2H <sub>2</sub> O	0,13-0,25	MRA.2.2
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,13-0,25	MRA.2.3
K <sub>4</sub> Fe(CN) <sub>6</sub> ×3H <sub>2</sub> O	0,13-1,00	MRA.2.4
α-Fe фольга	30 мкм	MRA.2.6

Образцовые поглотители содержат химические вещества, синтезированные на основе высокообогащённого <sup>57</sup>Fe (> 95 %) или природного железа. Эти вещества равномерно распределены по объёму полиэтиленовых дисков диаметром 20 мм, помещённых в алюминиевые держатели. Ферроцианиды калия и калия-магния [K<sub>4</sub>Fe(CN)<sub>6</sub>×3H<sub>2</sub>O; K<sub>2</sub>MgFe(CN)<sub>6</sub>] характеризуются узкими синглетами в Мёссбауэровских абсорбционных спектрах. Дигидрат оксалата железа [FeC<sub>2</sub>O<sub>4</sub>×2H<sub>2</sub>O] характеризуется квадратным расщеплением, приводящим к появлению дублета в Мёссбауэровских абсорбционных спектрах. Металлическое железо и оксид железа [α-Fe; Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>] характеризуются сверхтонким магнитным расщеплением спектральной линии, приводящим к появлению сектета в Мёссбауэровских абсорбционных спектрах.

## ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О КОМПАНИИ

Компания ООО «Криотрейд инжиниринг» образована в 2008 году. Основные направления деятельности компании:

- ✓ производство криогенного оборудования на основе собственных разработок
- ✓ поставка криогенного и аналитического оборудования лучших зарубежных производителей. «Криотрейд инжиниринг» является эксклюзивным представителем компаний **Cryomech, Inc.** и **Lake Shore Cryotronics, Inc.** а также представителем компании **attocube systems AG**

Компания открыта к сотрудничеству и участию в интересных проектах.

## СОБСТВЕННЫЕ РАЗРАБОТКИ



Заказчика

- ✓ **Сверхпроводящие магнитные системы**

- ✓ **Криостаты для научных исследований**  
«Криотрейд инжиниринг» производит криостаты для научных исследований. Криостаты проектируются и изготавливаются по техническому заданию или эскизам Заказчика.
- ✓ **Криогенные вакуумные камеры**  
«Криотрейд инжиниринг» осуществляет проектирование, инженерные расчеты и изготовление криогенных вакуумных камер по ТЗ

## ИМПОРТНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ

- ✓ **Криогенные рефрижераторы.**  
Криорефрижераторы и микроохладители ведущих мировых производителей, таких как Cryomech, Inc., SHI Cryogenics, Ricor, MMR и др.
- ✓ **Аналитическое оборудование**  
Вибромагнитометры и зондовые станции производства Lake Shore Cryotronics, Inc. Криогенные зондовые микроскопы и исследовательские комплексы производства немецкой компании attocube systems AG
- ✓ **Компактные станции для получения жидкого азота и гелия**  
Компактные азотные станции MMR, лабораторные станции ожижения азота и гелия Cryomech, Inc., высокопроизводительные комплексы Linde Kryotechnik AG и Stirling Cryogenics
- ✓ **Датчики, индикаторы и контроллеры температуры Lake Shore Cryotronics, Inc.**

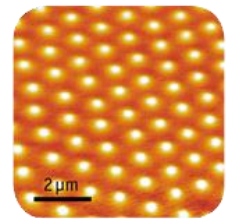
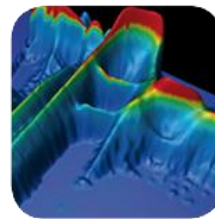
## ПОДРОБНЕЕ О НЕКОТОРОМ ОБОРУДОВАНИИ



**Криогенное оборудование и исследовательские комплексы attocube**

**Основные характеристики:**

- ✓ диапазон температур от 20 мК
- ✓ магнитные поля до 12 Т
- ✓ вакуум до  $10^{-11}$  мБар
- ✓ методы исследования: **AFM, MFM, SHPM, STM, CFM, RAMAN**



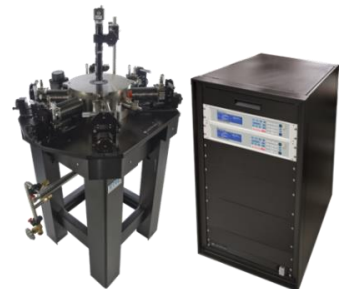
**Криогенные зондовые станции Lake Shore для широкого круга научных исследовательских задач**

**Основные характеристики:**

- ✓ диапазон температур от 1,6 до 675 К
- ✓ до 6 зондов
- ✓ магнитные поля до 3 Т

**Измерения:**

- ✓ ВАХ и ВФХ
- ✓ микроволновые и электрооптические измерения
- ✓ магнито-транспортные измерения
- ✓ измерения Холловских токов для определения подвижности носителей



**Вибрационные магнитометры Lake Shore на базе резистивного электромагнита с изменяемым зазором**

**Основные характеристики:**

- ✓ Магнитные поля до 3,42 Т
- ✓ Диапазон температур от 4,2 до 1273 К

**Измерения:**

- ✓ магнитный гистерезис
- ✓ магнитный момент
- ✓ остаточная намагниченность
- ✓ намагниченность насыщения
- ✓ магнитная анизотропия
- ✓ точка Кюри
- ✓ переход в сверхпроводящее состояние
- ✓ магнитная релаксация
- ✓ магнитная вязкость



**МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ  
И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ**

**Сборник материалов  
XIV Международной конференции**

Оформление обложки

***Н.П. Никитин***

Подписано в печать 08.09.2016.

Бумага офсетная. Печать цифровая.

Формат 60x84 1/16. Гарнитура «Times New Roman». Усл. печ. л. 11,86.

Уч.-изд. л. 11,73. Тираж 135 экз. Заказ 182/9

Отпечатано с готового оригинала-макета  
в типографии Издательства Казанского университета

420008, г. Казань, ул. Профессора Нужина, 1/37  
тел. (843) 233-73-59, 233-73-28