

Учреждение Российской академии наук
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
НИЦ “Курчатовский институт”
Учреждение Российской академии наук
Институт физики твердого тела РАН
Национальный комитет кристаллографов России
Научный совет РАН по физике конденсированных сред



VIII Национальная конференция
Рентгеновское, Синхротронное излучения,
Нейтроны и Электроны
для исследования наносистем и материалов.
Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии

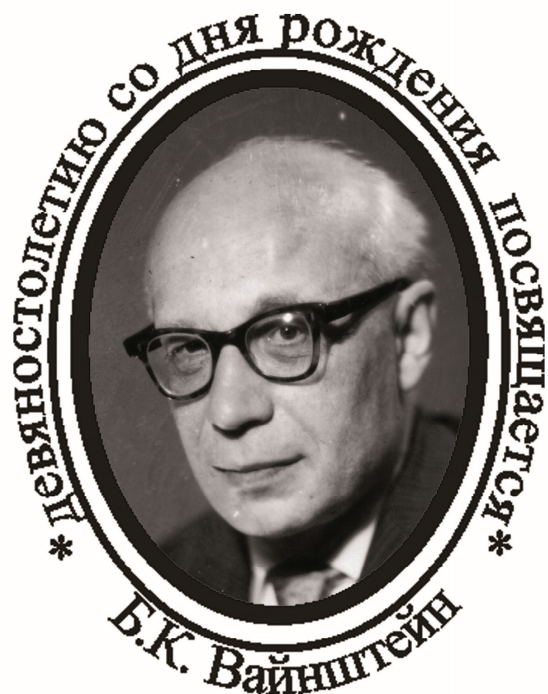
РСНЭ-НБИК 2011



ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

14-18 ноября 2011

Москва



Учреждение Российской академии наук
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
НИЦ «Курчатовский институт»
Учреждение Российской академии наук
Институт физики твердого тела РАН
Национальный комитет кристаллографов России
Научный совет РАН по физике конденсированных сред

VIII НАЦИОНАЛЬНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Рентгеновское, Синхротронное излучения,
Нейтроны и Электроны
для исследования наносистем и материалов.
Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии»
РСНЭ – НБИК 2011

Продолжение Всесоюзных совещаний по применению
рентгеновских лучей для исследования материалов

14-18 ноября 2011 года

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ИК РАН - НИЦ КИ
Москва, 2011

УДК 538.9:539.2:548+62:60:004

Тезисы докладов Восьмой Национальной конференции «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии» (РСНЭ-НБИК 2011). Москва, 14-18 ноября 2011 г.

Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, НИЦ "Курчатовский институт", Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела РАН, Национальный комитет кристаллографов России, Научный совет РАН по физике конденсированных сред. При поддержке Российской академии наук, Министерства образования и науки РФ, Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом», Российского фонда фундаментальных исследований, - М.: ИК РАН-НИЦ КИ, 2011. - 580 с.

**Печатается по решению оргкомитета конференции
РСНЭ-НБИК 2011**

ISBN

© ИК РАН
© НИЦ КИ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

Ковальчук Михаил Валентинович (ИК РАН, НИЦ КИ)

ЗАМЕСТИТЕЛИ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ

Каневский Владимир Михайлович (ИК РАН)

Кашкаров Павел Константинович (НИЦ КИ)

ЧЛЕНЫ ОРГКОМИТЕТА:

Адамчук Вера Константиновна (СПбГУ)
Алфимов Михаил Владимирович (ЦФ РАН)
Белушкин Александр Владиславович (ОИЯИ)
Болдырева Елена Владимировна (ИХТТМ СО РАН)
Быков Виктор Александрович (НТ-МДТ)
Волошин Алексей Эдуардович (ИК РАН)
Забродский Андрей Георгиевич (ФТИ им. Иоффе РАН)
Квардаков Владимир Валентинович (НИЦ КИ)
Кведер Виталий Владимирович (ИФТТ РАН)
Козлов Юрий Федорович (ИТЭФ)
Кудрявцев Николай Николаевич (МФТИ)
Кулипанов Геннадий Николаевич (ИЯФ СО РАН)
Нарайкин Олег Степанович (ИК РАН)
Макаров Александр Александрович (ИМБ РАН)
Матвеев Виктор Анатольевич (ИЯИ РАН)
Окороков Алексей Иванович (ПИЯФ РАН)
Панченко Владислав Яковлевич (ИПЛИТ РАН)
Пархоменко Юрий Николаевич (Гиредмет)
Попов Владимир Олегович (ИБХ РАН)
Пушаровский Дмитрий Юрьевич (МГУ)
Скрябин Константин Георгиевич (Центр "Биоинженерия" РАН)
Стриханов Михаил Николаевич (МИФИ)
Терещенко Елена Юрьевна (ИК РАН)
Фейгин Лев Абрамович (ИК РАН)
Чупрунов Евгений Владимирович (ННГУ)
Яцишина Екатерина Борисовна (НИЦ КИ)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

Аксенов Виктор Лазаревич (НИЦ КИ, ОИЯИ)

СОПРЕДСЕДАТЕЛЬ

Штромбах Ярослав Игоревич (НИЦ КИ)

ЧЛЕНЫ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА

Секция I. Биомолекулярные структуры, биосовместимые и органические материалы

Попов Владимир Олегович (*председ.*) (ИНБИ РАН)
Авдеев Михаил Васильевич (ОИЯИ)
Кислицын Юрий Алексеевич (ИК РАН)
Куранова Инна Петровна (ИК РАН)
Липкин Алексей Валерьевич (НИЦ КИ)
Ляшенко Андрей Владимирович (ИК РАН)

Секция II. Поверхности и слоистые наносистемы

Клечковская Вера Всеволодовна (*председ.*) (ИК РАН)
Андреева Марина Александровна (МГУ)
Имамов Рафик Мамедович (ИК РАН)
Марченков Алексей Николаевич (НИЦ КИ)
Новикова Наталья Николаевна (НИЦ КИ)
Чув Михаил Александрович (ФТИАН)

Секция III. Структура и динамика трехмерных систем

Асланов Леонид Александрович (*председ.*) (МГУ)
Макарова Ирина Павловна (ИК РАН)
Менушенков Алексей Павлович (МИФИ)
Михеева Маргарита Николаевна (НИЦ КИ)
Симонов Валентин Иванович (ИК РАН)
Сорокина Наталья Ивановна (ИК РАН)
Шехтман Вениамин Шоломович (ИФТТ РАН)

Секция IV. Информационные и когнитивные технологии

Велихов Василий Евгеньевич (*председ.*) (НИЦ КИ)
Анохин Константин Владимирович (ИФ РАН)
Асадчиков Виктор Евгеньевич (ИК РАН)

Груздева Наталья Михайловна (НИЦ КИ)
Прохорчук Егор Борисович (Центр "Биоинженерия" РАН)

**Секция V. Теория и численные методы в моделировании
рассеяния, дифракции и свойств материалов**

Волков Владимир Владимирович (*председ.*) (ИК РАН)
Бушуев Владимир Алексеевич (МГУ)
Дмитриенко Владимир Евгеньевич (ИК РАН)
Носик Валерий Леонидович (ИК РАН)

**Секция VI. Аппаратурно-методическое обеспечение
эксперимента**

Балагуров Анатолий Михайлович (*председ.*) (ОИЯИ)
Благов Александр Евгеньевич (НИЦ КИ)
Занавескин Максим Леонидович (НИЦ КИ)
Сенин Роман Алексеевич (НИЦ КИ)
Толочко Борис Петрович (ИХТТМ СО РАН)
Хейкер Даниэль Моисеевич (ИК РАН)

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ КОНФЕРЕНЦИИ

Янусова Людмила Германовна (ИК РАН)

Организаторы конференции

- Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
- Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"
- Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела РАН
- Национальный комитет кристаллографов России
- Научный совет РАН по физике конденсированных сред

При поддержке

- Российской академии наук,
- Министерства образования и науки Российской Федерации,
- Государственной корпорации по атомной энергии (Росатом),
- Российского фонда фундаментальных исследований

ОГЛАВЛЕНИЕ

Пленарные доклады	7
Секция I: Биомолекулярные структуры, биосовместимые и органические материалы	
Устные доклады.....	21
Стендовые доклады.....	43
Секция II: Поверхности и слоистые наносистемы	
Устные доклады.....	97
Стендовые доклады.....	129
Секция III: Структура и динамика трехмерных систем	
Устные доклады.....	237
Стендовые доклады.....	275
Секция IV: Информационные и когнитивные технологии	
Устные доклады.....	367
Стендовые доклады.....	377
Секция V: Численные методы, компьютерное моделирование, теория рассеяния и дифракции	
Устные доклады.....	383
Стендовые доклады.....	421
Секция VI: Аппаратурно-методическое обеспечение эксперимента	
Устные доклады.....	489
Стендовые доклады.....	523
Авторский указатель	561

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

КОМПЛЕМЕНТАРНОСТЬ НЕЙТРОННЫХ И СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В СТРУКТУРНОЙ НАНОБИОДИАГНОСТИКЕ

М.В.Авдеев^{1),2)}, В.Л.Аксенов^{2),1)}

¹⁾ *Лаборатория нейтронной физики им. И.М.Франка,
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

²⁾ *НИЦ "Курчатовский институт", Москва*

Характерной чертой современных структурных исследований высокодисперсных наносистем является комплексное использование различных дополняющих методов, каждый из которых позволяет уточнять в той или иной степени уникальные моменты внутренней организации системы. В настоящем докладе проводится сравнение возможностей и ограничений различных методов при характеристике коллоидных систем биомедицинского назначения с особым акцентом на совместное применение рассеяния нейтронов и синхротронного излучения. В качестве основного примера рассмотрены дисперсии магнитных наночастиц, используемые в синтезе магнитных систем для адресной доставки лекарственных препаратов, контрастных сред в магнито-резонансной томографии, терапии раковых опухолей и др. заболеваний. Структурная информация играет важную роль в регулировании свойств таких систем и улучшении их агрегационной устойчивости в различных условиях [1,2].

Обсуждается общий вопрос использования результатов различных структурных методов в дополняющих друг друга исследованиях дисперсных наносистем. Существенную проблему при интерпретации экспериментальных данных представляет собой неравновесная агрегация частиц, и, как следствие, получаемые структурные параметры характеризуют не только свойства отдельных наночастиц, но и термодинамическую устойчивость системы. Их использование в прецизионном описании наночастиц в многокомпонентных и полидисперсных системах требует отдельного рассмотрения для каждого вида систем.

[1] М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов, УФН. 2010. т.180, №10, с.1009.

[2] В.Л.Аксенов, М.В.Авдеев, А.В.Шуленина, Я.В.Зубавичус, А.А.Велигжанин, Л.Рошта, В.М.Гарамус, Л.Векаш, Кристаллография 2011. т.56, №6, с.848.

Авдеев Михаил Васильевич, кфмн
141980, Дубна, Моск.обл., Жолито-Кюри., 6, ОИЯИ, ЛНФ
Тел.: (49621) 62-674; Факс: (49621) 65-484; E-mail: avd@nf.jinr.ru

РОЛЬ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ СИЛ В СТРУКТУРНОЙ ДИНАМИКЕ МУЛЬТИДОМЕННЫХ БЕЛКОВ ИММУНОГЛОБУЛИНОВОГО СУПЕРСЕМЕЙСТВА НА ПРИМЕРЕ ФИБРИЛЛЯРНОГО МЫШЕЧНОГО БЕЛКА ТАЙТИНА

А.А.Вазина^{1,2)}, Н.Ф.Ланина¹⁾, М.А.Шеромов³⁾, В.Д.Васильев⁴⁾, М.И.Самойлович⁵⁾

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

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

⁴⁾ *Институт белка РАН, Пущино*

⁵⁾ *ЦНИТИ «Техномаш», Москва*

Целью данной работы было выяснение роли внешнего поля сил в наноструктурной и молекулярной динамике гигантского мультидоменного тайтина – белка третьей фибриллярной системы мышцы, обеспечивающего высокую податливость и сверхэластичность мышечной ткани. По оригинальным рентгендифракционным исследованиям ориентированных тайтиновых нитей в комбинации с кристаллографическими данными гомологичных белков иммуноглобулинового суперсемейства нами промоделирована структурная морфология молекулы тайтина. Точечная группа симметрии молекулы тайтина определена как S_m с трансляцией вдоль оси t_∞ , меридиональные рефлексы для этой группы симметрии запрещены (A.Vazina et al., *J. Struct. Biol.*, 2006, 155, 251). Симметрия самоорганизации аксиальных наноструктур из генерирующих кластеров зависит от топологических свойств пространства и физических полей. Отличительной особенностью структуры мультидоменных белков иммуноглобулинового суперсемейства является уникальная возможность сочетанного проявления и жесткости, и эластичности, которое обусловлено гетерофазными переходами с когерентными границами в наноструктурированных системах. Под воздействием поля внешних сил в стренде тайтина реализуются значительные различия термодинамических характеристик гомологичных доменов.

Рентгендифракционные исследования нитей тайтина в процессе механического растяжения выявили двухфазное разделение структуры в нанодиапазоне, когда в одной линейной макромолекуле устойчиво сосуществуют «кристаллическое» и «расплавленное» состояние полипептидной цепи. Это уникальное состояние аperiодической структуры под влиянием внешнего поля сил способно обеспечивать как высокую податливость, так и жесткость системы, характерную для функциональной сверхэластичности тайтина. Таким образом, впервые показано, что исполнительный механизм мультидоменных фибриллярных белков иммуноглобулинового суперсемейства с аperiодической упаковкой обеспечивается за счет энергии внешнего воздействия.

Работы выполняются при поддержке гранта РФФИ № 10-02-01121.

Вазина Альвина Андреевна, доцент
142290, Пущино, ул. Институтская, д.3
Тел.: (4967)739161; Факс: (4967)330553; E-mail: vazina@mail.ru

СТРУКТУРНАЯ ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ И МЕТОДЫ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРОЕНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Р.М.Имамов, В.В.Клечковская, Е.И.Суворова

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

Возможность получать достоверные данные о структуре материалов с размерами кристаллитов в нанометровом диапазоне появилась с момента открытия дифракции электронов в 1927г. Были разработаны методики геометрического анализа различных типов дифракционных картин. С середины прошлого века закладываются теоретические основы и развивается метод независимого электронографического структурного анализа кристаллических и аморфных веществ, где ведущую роль играют работы З.Г.Пинскера и Б.К.Вайнштейна [1,2]. В настоящей работе обсуждаются возможности электронографического структурного анализа [3] и различных методов просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения [4] для локального анализа строения наноматериалов. Рассматривается несколько примеров использования быстрого преобразования Фурье и моделированных высокоразрешающих электронномикроскопических изображений для идентификации нанопаз при исследовании строения нанокристаллов и наночастиц. Отмечен вклад Б.К. Вайнштейна в разработку единого подхода к проблеме определения структуры материи с помощью дифракции коротких волн.

1. Пинскер З.Г. Дифракция электронов. М.: Изд-во АН СССР. 1949. 404 с.
2. Вайнштейн Б.К. Структурная электронография. М., Изд-во АН СССР, 1956. 314 с
3. Клечковская В.В., Имамов Р.М. Электронографический структурный анализ (от Вайнштейна до наших дней) // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 4. С.598-613.
4. Р. М. Имамов, В. В. Клечковская, Е. И. Суворова Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения для решения задач кристаллографии наноматериалов // Кристаллография. 2011. Т. 56, № 4, с. 608–620

Имамов Рафик Мамед, профессор
119333, Москва, Ленинский просп., д.59.
Тел.: 8(499)1353500; E-mail: imamov@ns.crys.ras.ru

КВАНТОВАЯ КРИТИЧЕСКАЯ ТОЧКА И СПИНОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ В ФЕРРОПЕРИКЛАСЕ (Mg,Fe)O В НИЖНЕЙ МАНТИИ ЗЕМЛИ

И.С. Любутин¹⁾, В.В. Стружкин²⁾, А.А. Миронович³⁾, А.Г. Гаврилюк^{1,4)}, П.Г. Наумов¹⁾,
С. Г. Овчинников⁵⁾

¹⁾*Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾*Geophysical Laboratory, Carnegie Institute of Washington, Washington DC, USA*

³⁾*Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Московская обл.*

⁴⁾*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.*

⁵⁾*Институт физики им. Л.В Киренского, Красноярск*

Ферропериклас (Mg,Fe)O является вторым по распространённости минералом в нижней мантии Земли после силикатного перовскита (Mg,Fe)SiO₃. Электронные спиновые состояния железа существенно влияют на свойства этих фаз, и важны для понимания природы состояния вещества в глубинных слоях Земли. Индуцированные высоким давлением переходы из высокоспинового (HS-high spin) в низкоспиновое (LS – low spin) состояние могут кардинально изменить физические и химические свойства минерала (Mg,Fe)O, включая термо- и электро- проводимость, плотность, сжимаемость, скорости звука и другие. Чтобы изучить основное состояние ионов железа Fe²⁺ мы провели исследования электронных и магнитных свойств кристалла (Mg_{0.75},Fe_{0.25})O методами трансмиссионной (TMS) и синхротронной (SMS) мёссбауэровской спектроскопии при высоких давлениях и низких температурах гелиевого диапазона. Установлено, что основное электронное состояние ионов Fe²⁺ при критическом давлении P_c HS-LS перехода и при нулевой температуре определяется квантовой критической точкой P_q ($T=0, P_c$), в которой разность энергий между HS и LS состояниями (спиновая щель) равна нулю. Отклонение от нуля температур ведёт к термическим возбуждениям HS или LS состояний, и может сильно влиять на физические (магнитные) свойства материала. Наши теоретические расчёты показывают, что наличие квантовой критической точки при $T=0$ определяет не только фундаментальные свойства основного состояния, но также сильно влияет на свойства минералов при высоких температурах и давлениях в нижней мантии Земли.

Работа выполнена при поддержке Программы ОФН РАН «Сильно коррелированные электронные системы» и РФФИ грант № 11-02-00636

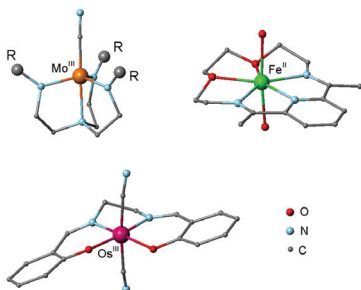
Любутин Игорь Савельевич д.ф.-м.н., профессор
119333, Москва, Ленинский пр-т 59, Институт кристаллографии РАН
Тел: 8(499)1356250; E-mail: lyubutin@ns.crys.ras.ru

ПРОБЛЕМА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОМАГНИТОВ:
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-МАГНИТНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И РАЗРАБОТКА
ПРИНЦИПОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДИЗАЙНА

Миронов В.С.

Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН Москва, Россия, mirsa@list.ru

Рассматривается проблема создания мономолекулярных наномагнитов (МН, единичных молекул с эффектом магнитной памяти – перспективных материалов для молекулярной электроники [1]) с высокой рабочей температурой и обсуждаются конкретные пути ее решения. Основной задачей является разработка новых методов радикального повышения внутримолекулярной магнитной анизотропии МН. Показано, что наиболее перспективный подход основан на введении в структуру МН орбитально-вырожденных $4d$ и $5d$ комплексов с размороженным



орбитальным моментом. При сочетании с высокоспиновыми $3d$ ионами такие комплексы образуют обменно-связанные $4d-3d$ и $5d-3d$ пары с сильно анизотропными обменными взаимодействиями, которые можно использовать в качестве чрезвычайно эффективного источника молекулярной анизотропии [2-4]. Рассмотрены различные типы орбитально-вырожденных $4d$ и $5d$ комплексов, исследованы механизмы анизотропных обменных

взаимодействий с их участием и установлены основные закономерности структурно-магнитных корреляций. Сформулированы общие принципы и количественные критерии для поиска и отбора наиболее перспективных $4d$ и $5d$ комплексов для их использования в качестве молекулярных строительных блоков с целью создания высокотемпературных МН. Найдены новые молекулярные строительные блоки с сильной магнитной анизотропией, в частности, $4d$ и $5d$ комплексы с плоскими полидентатными макроциклическими лигандами (см. рис.). Предложены конкретные молекулярные структуры МН с участием таких комплексов с ожидаемой температурой блокирования намагниченности T_b несколько десятков К. На конкретных примерах обсуждаются методы организации и оптимизации молекулярной структуры МН для получения максимальной магнитной анизотропии и достижения высокой рабочей температуры ($T_b \sim 70 - 100$ К и выше; современное значение $T_b < 10$ К).

1. V.S. Mironov, L.F. Chibotaru, A. Ceulemans, *J. Amer. Chem. Soc.* 2003, **125**, 9750-9760.
2. В.С. Миронов, *Докл. РАН (физическая химия)* 2004, **397**, 155-158.
3. В.С. Миронов, *Докл. РАН (физическая химия)* 2006, **408**, 348-354.
4. В.С. Миронов, *Докл. РАН (физическая химия)* 2007, **415**, 357-363.

МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ НА ОСНОВЕ СТОЯЧИХ ДИФFUЗНЫХ ВОЛН

В.Б. Молодкин¹⁾, М.В. Ковальчук²⁾, А.П.Шпак¹⁾

¹⁾ *Институт металлофизики НАН Украины, Киев*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

В отличие от классической кристаллографии, которая изучает параметры только идеальных периодических решеток кристаллов, кристаллография на диффузном рассеянии изучает отклонения от периодичности, обуславливающие это диффузное рассеяние, т.е. она количественно устанавливает без разрушений характеристики дефектов и параметры искусственно созданных нанотехнологиями сверхструктур, которые и определяют основные физические свойства разрабатываемых материалов. В настоящей работе установлена интерференционно-ориентационная, т.е. принципиально динамическая, природа недавно открытого авторами важного для диагностики явления – исключительно высокой чувствительности к характеристикам дефектов зависимости картины динамического рассеяния от условий дифракции, что наблюдается как многообразность диффузодинамической картины и обеспечивает уникальную возможность создания на этой основе управляемой многопараметрической кристаллографии (в том числе и наносистем), т.е., создан чрезвычайно информативный структурный метод стоячих диффузных волн. При этом показано, что при переходе от кинематического рассеяния к динамическому законы дисперсии как для брэгговских, так и для диффузных волн приобретают блоховские интерференционные свойства, в результате которых принципиально изменяется характер взаимодействия излучения с кристаллом, а именно, проявляется уникальная ориентационная зависимость, описывающая переход характера взаимодействия от динамического к кинематическому при отклонениях от условий Вульфа-Брэгга. Указанные ориентационные эффекты и их зависимости от условий дифракции, а также от характеристик дефектов обеспечивают в целом появление указанных выше уникальных информативных возможностей многообразной диффузодинамической картины рассеяния, в частности, возможности многопараметрической диагностики.

Молодкин Вадим Борисович, профессор, чл.-кор. НАН Украины
03680, Украина, Киев, бульв. Академика Вернадского, 36
Тел.: +(38044)4240530; Факс: +(38044)4242561; E-mail: molodkn@imp.kiev.ua

STUDY OF NANOSYSTEMS AT THE EUROPEAN XFEL

S.L. Molodtsov

European XFEL GmbH, 22671 Hamburg, Germany

The European XFEL is a new international research installation that is currently under construction in the Hamburg area in Germany. The facility will generate new knowledge in almost all the technical and scientific disciplines that are shaping our daily life – including nanotechnology, medicine, pharmaceuticals, chemistry, materials science, power engineering and electronics.

The ultra-high brilliance femtosecond X-ray flashes of coherent radiation will be produced in a 3.4-kilometre-long facility. Most of it will be housed in tunnels deep below ground. Three sites will provide access to the tunnels and the experiment stations. In its start-up configuration, the European XFEL will comprise 3 self-amplified spontaneous emission (SASE) light sources – undulators operating in energy ranges 3 – 25 keV (SASE 1 and SASE 2) and 0.2 – 3 keV (SASE 3), respectively. Six experimental stations optimized for particular purposes will be installed. Each experiment requires light with special properties, such that the stations are permanently assigned to the different light sources (beamlines) of the European XFEL.

On 8 January 2009, civil engineering work (tunnels, shafts, halls) has been started at all three construction sites. In this presentation status and further parameters of the European XFEL facility as well as planned research applications in the field of nanosystems are reviewed.

СТРАТЕГИЯ СБОРА ДИФРАКЦИОННЫХ ДАННЫХ ОТ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

А. Н. Попов

ESRF, Grenoble, Франция

Представлен краткий обзор современных методов и аппаратуры для измерения дифракции от монокристаллов макромолекул с использованием синхротронного излучения (СИ). Высокая яркость и сверхмалая расходимость пучков СИ открыла возможность исследовать слабо дифрагирующие и чрезвычайно мелкие кристаллы (~0.005 мкм) биологических молекул (белки и их комплексы, вирусы, ДНК и комплексы ДНК с белками, мембранные белки, лекарственные препараты). Возможность плавной подстройки длины волны СИ к краям поглощения определенных элементов позволяет измерять аномальное рассеяние и таким образом решать фазовую проблему.

Несмотря на рутинное использование низкотемпературных съемок, одной из основных проблем эксперимента является быстрое разрушение кристаллов как следствие радиационных повреждений. Представлены модели, описывающие радиационные разрушения и способы учета этих эффектов для оптимального планирования измерений. Так же обсуждены: оптимальный сбор данных от множества мелких кристаллов, кристаллов плохого качества, методы сканирования и отбора наилучших образцов.

Попов Александр Николаевич
ESRF, BP 220, 38043 GRENOBLE CEDEX 9, FRANCE
Тел.: +33(0)47688-26-33; Факс: +33 (0) 47688-29-04; E-mail: apopovi@esrf.fr

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

A. Роголев

European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), France

Источники синхротронного излучения третьего поколения создают принципиально новые возможности для исследователей и открывают новые грани взаимодействия рентгеновского излучения с веществом. Особенно важными для этого явились новые разработки в области генерации интенсивных потоков рентгеновского излучения с контролируемой поляризацией, линейной или круговой. Поляризованное рентгеновское излучение оказывается чувствительным не только к электронной плотности, но также и к магнитной структуре, а рентгеновская оптика является анизотропной и, подобно оптике видимого диапазона, проявляет такие свойства, как линейный и круговой дихроизм, двулучепреломление, гиротропию и др.

В этом докладе дается обзор последних достижений в области использования циркулярно поляризованного рентгеновского излучения для исследования электронной и магнитной структуры кристаллов. Дав краткое введение в принципы и экспериментальные аспекты спектроскопии магнитного кругового дихроизма в рентгеновском диапазоне, внимание будет сосредоточено на основных преимуществах этого метода: количественное определение спинового и орбитального магнитных моментов селективно для каждого элемента, а также анизотропии этих моментов. Результаты экспериментальных исследований выполненных в Европейском центре синхротронного излучения (ESRF) будут представлены для демонстрации применения этого метода к исследованиям ферро- и парамагнитных кристаллов.

В заключении, будут представлены новые результаты измерений естественного кругового дихроизма в гиротропных монокристаллах, а также магнито-хирального дихроизма в мультиферроиках. Эти эффекты проанализированы с помощью так называемых правил сумм, которые позволяют определить средние значения эффективных операторов связанных с орбитальными токами в нецентросимметричных кристаллах.

СИНХРОТРОННОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ КАК УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕТОД СТРУКТУРНОЙ НАНОДИАГНОСТИКИ

Д.И. Свергун

Европейская Молекулярно-Биологическая Лаборатория, Гамбург, Германия

Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (МУР) - универсальный дифракционный метод исследования надатомной структуры веществ, возможности которого неизмеримо выросли в последние годы благодаря появлению ярких источников синхротронного излучения (СИ). В настоящее время этот классический метод переживает ренессанс в структурных исследованиях разупорядоченных или частично упорядоченных наноразмерных систем самой различной природы [1]. В структурных исследованиях растворов биологических макромолекул, МУР позволяет изучать строение нативных частиц и анализировать структурные отклики на изменения во внешних условиях. Недавно развитые новые методы анализа данных рассеяния значительно улучшили разрешение и надежность структурных моделей определяемых с помощью МУР. Использование СИ и новые подходы к автоматизации эксперимента и обработки данных сделали МУР эффективным инструментом для крупномасштабных структурных исследований в молекулярной биологии. Метод позволяет определять формы макромолекул *ab initio* на низком разрешении, а также может быть эффективно использован вместе с другими структурными и биохимическими методами в мультидисциплинарных исследованиях для моделирования строения комплексов методом молекулярной тектоники. Новые подходы для анализа данных оказались применимы и для небиологических объектов, в частности, для структурного анализа процессов формирования металлических наночастиц в полимерных и водных носителях. Новые возможности методики синхротронного МУР для структурной нанодиагностики проиллюстрированы примерами практических биологических и нанотехнологических приложений.

[1]. Д. И. Свергун, Э. В. Штыкова, В. В. Волков & Л. А. Фейгин (2011) Рентгеновское малоугловое рассеяние, синхротронное излучение и структура био- и наносистем. *Кристаллография*, **56**, 777-804.

ДИАГНОСТИКА БИОДЕГРАДАЦИИ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ В ЖИВОМ ОРГАНИЗМЕ НА ОСНОВЕ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

М.А.Чуев^{1,2)}, В.М.Черепанов¹⁾, М.А.Поликарпов¹⁾, В.Я.Панченко¹⁾, М.В.Ковальчук¹⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²⁾ Физико-технологический институт РАН, Москва

В последние годы наблюдается бурный рост фундаментальных исследований магнитных наночастиц применительно к актуальным задачам физики, химии, биологии и медицины. Особо привлекательны магнитные наночастицы для биомедицинских исследований прежде всего из-за того, что целый ряд из них уже допущен для внутривенных инъекций человеку. Однако, несмотря на обширные исследования в этой области, процессы катаболизма наночастиц в организме изучены далеко не полностью, что предопределяет необходимость проведения исследований биораспределения, биodeградации и метаболизма наночастиц в живом организме. Более того, несмотря на то, что практически все биологические и медицинские приложения наночастиц основаны именно на их магнитных характеристиках, задача надежного определения этих характеристик, как правило, решается лишь на уровне качественных оценок.

В настоящей работе разработана и реализована аналитическая методика для диагностики биodeградации магнитных наночастиц в живом организме на основе гамма-резонансной спектроскопии. На примере введения магнитных наночастиц в организм мышей показано, что даже минимальный набор экспериментальных данных из трех мессбауэровских спектров, измеренных при разных температурах и во внешнем магнитном поле, вместе с кривой намагничивания позволяет надежно оценить ключевые характеристики наночастиц и продуктов их биотрансформации на каждом этапе биodeградации в живом организме. Информативность этой методики главным образом основана на одновременном анализе всего набора экспериментальных данных для каждого образца в рамках единой модели магнитной динамики ансамбля наночастиц.

Чуев Михаил Александрович, д.ф.-м.н.
117218, Москва, Нахимовский просп., 36, корп. 1
Тел.: 8(499)1296810; Факс: 8(499)1293141; E-mail: chuev@ftian.ru

СЕКЦИЯ I

Биомолекулярные структуры,
биосовместимые и органические
материалы

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СТРУКТУРЫ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ (ИЖ)

Л.А.Асланов

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Структуры ИЖ исследуются методами мало- и широкоугольного рассеяния рентгеновских, синхротронных лучей и пучков нейтронов с последующей интерпретацией кривых радиального распределения методом молекулярной динамики (МД). Несмотря на активные исследования, модели структур ИЖ в жидком состоянии отсутствуют, хотя и повсеместно подчеркивается их необходимость. В настоящем сообщении предлагается модель структуры ИЖ в жидком состоянии на основе экспериментальных данных, опубликованных в литературе для имидазольных и тетраалкиламмонийных ИЖ.

Согласно предлагаемой модели, катионы и анионы имидазольных ИЖ образуют октупольные агрегаты, соединяющиеся между собой встречно направленными алкильными фрагментами мицеллярного характера. Октуполи и алкильные домены – это две компоненты структурных гетерогенностей. Структура может быть представлена как совокупность октуполей и алкильных доменов, расположенных по мотиву двух структур типа алмаза, вставленных друг в друга с совмещением элементов симметрии. Центры октуполей совпадают с положениями атомов углерода структуры алмаза, а вдоль «связей С-С» располагаются длинные алкильные заместители имидазоля. Обсуждаются причины отсутствия дальнего порядка. «Октупольное» расположение катионов и анионов справедливо для ИЖ с тетраалкиламмонийными катионами.

Проверка модели будет проведена по соответствию свойств ИЖ их структуре и сопоставлением с современной теорией насыщенных растворов электролитов.

Асланов Леонид Александрович, профессор
119991, Москва, МГУ, химфак, каф. общ. химии
Тел.: (495)939-13-27; E-mail: aslanov@struct.chem.msu.ru

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В R-ФИКОЭРИТРИНЕ: ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ВОЗДЕЙСТВИЕ НА БЕЛКОВУЮ МАТРИЦУ

О.Д. Бекасова, И.В. Сафенкова, А.Л. Русанов, Н.А. Чеботарева, Б.И. Курганов

Институт биохимии им. А.Н. Баха РАН, Москва

Флуоресцирующие квантовые точки (КТ) как новый класс флуорофоров перспективны для создания биомаркеров нового поколения в области клинической диагностики. Разработан метод получения КТ CdS с использованием фотосинтетического пигмента красных водорослей R-фикоэритрина. К достоинствам R-фикоэритрина как матрицы относятся: наличие идентичных наноканалов в центре молекул, высокая растворимость в воде, фоточувствительность, отсутствие токсичности. Элементный состав КТ CdS определен по энергодисперсионным спектрам рентгеновского характеристического излучения. По данным спектрального анализа, атомно-силовой и электронной микроскопии определен размер частиц. Совпадение размеров КТ и полости R-фикоэритрина (6.0×3.2 нм), а также сходство электрофореграмм свободного R-фикоэритрина и R-фикоэритрина с включенной в него КТ CdS доказывают, что местом синтеза КТ являются наноканалы в молекулах R-фикоэритрина. На основании данных селективной флуориметрии сделан вывод, что синтезированные КТ состоят из кластеров, между которыми осуществляется направленный перенос энергии возбуждения. При помощи конфокального флуоресцентного микроскопа измерены времена жизни флуоресценции единичной КТ в молекуле R-фикоэритрина, диффундирующей в воде (0.26 нс) и адсорбированной на стекле (0.83 нс). В процессе синтеза КТ CdS структура R-фикоэритрина претерпевает глобальные изменения. Методами аналитического ультрацентрифугирования и атомно-силовой микроскопии обнаружено новое свойство КТ CdS: они ограничивают конформационную подвижность белка и придают ему дополнительную механическую прочность.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 11-04-00932-а) и Программы «Молекулярная и клеточная биология» Президиума РАН.

Бекасова Ольга Демьяновна

119071, Москва, Ленинский пр., 33

Тел.: 8(495)9520243; Факс: 8(495)9545283; E-mail: bekasova@bk.ru

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА МЕТОДОМ ПРЕЦИПИТАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСТОЧНИКА БИОГЕННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Э.П. Домашевская, В.М. Кашкаров, Д.Л. Голощапов, Н.А. Румянцева, П.В.Середин,
А.С.Леньшин, Б.Л.Агапов

Воронежский государственный университет, Воронеж

Гидроксиапатит (ГАП) – материал, наиболее активно используемый в ортопедии и стоматологии в качестве биопокрытий имплантатов для улучшения их остеоинтеграции с костной тканью. В нашей работе ГАП был синтезирован методом преципитации с использованием биологического источника - яичной скорлупы птиц. Исследования, проведенные с помощью методов рентгеновской дифракции, ИК – спектроскопии, растровой электронной микроскопии показали, что полученный нами порошкообразный материал состоящий из глобул микронных размеров (4-5 μm) является однофазным, термически стабильным до 900⁰С, морфологически однородным. Глобулы состоят из нанокристаллов со средними размерами порядка 50 нм.

Сопоставление данных всех методов анализа показало, что с увеличением температуры отжига происходит не только изменение фазового состава, но и увеличение размеров кристаллов порошка ГАП.

Результаты сорбиметрии и растровой электронной микроскопии показывают, что с возрастанием температуры отжига происходит существенная агломерация частиц и увеличение их размеров от ~50 до ~150 нм.

Результаты микроанализа и наблюдение за параметрами pH в ходе реакции позволили обнаружить что с: при уменьшением значения pH раствора содержащего ГАП, соотношение Ca/P также уменьшается от 2.1 до 1.7, приближаясь к стехиометрическому (1,76), что не способствует, однако, повышению их температурной стабильности

Домашевская Эвелина Павловна, зав. каф.ФТТНС ВГУ
394006, Воронеж, Университетская пл., д.1
Тел.: (473)2208363; Факс: (473)2208363; E-mail: ftt@phys.vsu.ru

НАНОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА МОДЕЛЬНЫХ МЕМБРАН ВЕРХНЕГО СЛОЯ КОЖИ STRATUM CORNEUM. ИССЛЕДОВАНИЯ НА НЕЙТРОННЫХ И СИНХРОТРОННЫХ ИСТОЧНИКАХ

М.А. Киселев^{1,2)}

¹⁾ *Лаборатория нейтронной физики, ОИЯИ, Дубна*

²⁾ *НБИК, РНЦ «Курчатовский институт», Москва*

Stratum corneum (SC) является верхнем слоем кожи и её главным барьером. Диффузия вещества через SC идет по липидной матрице, главными компонентами которой являются керамиды. Роль керамидов в формировании наноструктуры липидной матрицы SC и её диффузионных свойств является предметом активных исследований фармацевтов, создающих трансдермальные лекарства. Модельные мембраны SC являются наиболее подходящим объектом для таких исследований. В докладе представлены результаты нейтронных и синхротронных исследований выполненных на модельных мембранах SC и, созданная на их основе, модель арматурного укрепления липидной матрицы SC молекулами керамида 6. Обсуждаются фармацевтические выводы модели арматурного укрепления по увеличению проницаемости кожи для лекарств [1-4].

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий» в рамках Госконтракта 16.552.11.7003 и российско-германского гранта DFG-РФФИ 10-04-91330.

1. M. A. Kiselev, N. Yu. Ryabova, A. M. Balagurov, et al. New insights into structure and hydration of stratum corneum lipid model membrane by neutron diffraction. *European Biophys. J.* 34 (2005) 1030–1040.
2. М.А. Киселев. Конформация молекул керамида 6 и chain-flip переходы в липидной матрице верхнего слоя кожи - Stratum Corneum. *Кристаллография* 52 (2007) 549-553.
3. A. Schroeter, D. Kessner, M.A. Kiselev, et al., Basic nanostructure of CER[EOS]/ CER[AP]/ CHOL/ FFA multilamellar membranes. A neutron diffraction study. *Biophysical J.* 97 (2009) 1104-1114.
4. М.А. Киселев. Методы исследования липидных наноструктур на нейтронных и синхротронных источниках. *ЭЧАЯ*, 42 (2011) 578-635

Киселев Михаил Алексеевич, к.ф.-м.н
141980, Дубна, Жолио-Кюри, д. 6
Тел.: (496)2166977; Факс: (496)2165484; E-mail: kiselev@nf.jinr.ru

МОДЕЛЬ РОСТА КРИСТАЛЛОВ ГИДРОКСИАПАТИТА НА ЦЕЛЛЮЛОЗЕ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

В.В. Клечковская¹⁾, Н.А. Бульенков²⁾, Е.А. Желиговская²⁾,

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

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

В последние годы стремительно растет интерес к проблеме создания костного прекурсора, приближающегося по своим свойствам к живой костной ткани, представляющей собой природный нанокompозит, в состав которого входят коллагеновые волокна с нанокристаллами фосфата кальция. В настоящей работе в качестве биологически активной матрицы (скаффолда) для формирования композита-прекурсора рассматривается целлюлоза, продуцируемая бактериями *Acetobacter xylinum* (ЦАХ) (штамм, сохраняемый в СПбГУ [1]), обладающая биосовместимостью и уникальными физико-механическими и сорбционными характеристиками. Представлены результаты структурного моделирования процесса самоорганизации в водной среде композита на основе наночибрилл ЦАХ и гидроксиапатита (ГА) с учетом ранее высказанного предположения о том, что связанная вода играет ключевую роль в самоорганизации биологических и бионеорганических систем [2].

В настоящей работе рассмотрены метрические соотношения между параметрами различных граней ЦАХ и ГА и параметрами кристаллического аппроксиманта структуры поверхностного слоя воды на границе с газовой фазой [3]. Показано, что в образовании композита ГА/ЦАХ присутствие связанной воды может иметь решающее значение.

1. В.В. Клечковская и др. // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 5. С. 813.
2. Н.А. Бульенков // Биофизика. 2005. Т. 50. № 5. С. 934.
3. Н.А. Бульенков, Е.А. Желиговская и др.// Кристаллография. 2011.Т. 56.№ 2.С.319.

Клечковская Вера Всеволодовна, профессор
119333, Москва, Ленинский пр., д.59
Тел.: 8(499)1353500; Факс: 8(499)1351011; E-mail: klechvv@ns.crys.ras.ru

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ШАПЕРОНОВ НА СТРУКТУРУ, ДИНАМИКУ И ФУНКЦИЮ БЕЛКОВ

Ю.Ф.Крупянский¹⁾, Э.Г.Абдулнасыров¹⁾, Н.Г. Лойко²⁾, П.П.Нокс³⁾, А.С. Степанов¹⁾, К.Б.Терешкина¹⁾, В.В.Волков⁴⁾, Г.И.Эль-Регистан²⁾, А. Б. Рубин³⁾

¹⁾ *Институт химической физики им Н.Н.Семенова РАН, Москва*

²⁾ *Институт микробиологии им. С.Н. Виноградского, РАН, Москва*

³⁾ *Биологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

⁴⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Исследовано влияние нескольких химических шаперонов: глицерина, 4 – гексилрезорцина, 5 - метилрезорцина и некоторых других в большом диапазоне их концентраций на структуру, равновесные флуктуации и функциональную активность водорастворимого фермента лизоцима и трансмембранного белка реакционного центра (РЦ) бактерий *Rb. sphaeroides*. Выбранные химические шапероны сильно различаются по структуре и своему действию на водорастворимые и мембранные белки. Влияние химических шаперонов (кроме метилрезорцина) на структурно-динамические и функциональные характеристики лизоцима и белка РЦ хорошо описывается в рамках расширенных моделей предпочтительной гидратации и предпочтительного взаимодействия белка с химическим шапероном. Молекула гексилрезорцина состоит из гидрофобной (алкильный радикал) и гидрофильной (ароматическое ядро) частей, что позволяет регулировать функциональную активность лизоцима и белка РЦ. Метилрезорцин, в отличие от глицерина и гексилрезорцина, взаимодействует с поверхностью лизоцима непосредственно, а не через водородные связи, что приводит, при повышении его концентрации, к сильному увеличению амплитуды равновесных флуктуаций и позволяет ему быть мощным активатором. Проведенные исследования показывают, что различные химические шапероны (при данной концентрации) и различные концентрации данного химического шаперона формируют отличающиеся трехмерные структуры белков, разнящиеся по своим динамическим и функциональным характеристикам.

Крупянский Юрий Федорович, д.ф.-м.н., профессор
119991, Москва, ул.Косыгина 4
Тел.: 8(495)9397300; Факс: 8(499)1378318; E-mail: yufk@chph.ras.ru

**ИССЛЕДОВАНИЯ ПИРИМИДИНФОСФОРИЛАЗ МЕТОДАМИ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ -
КЛЮЧ К СОЗДАНИЮ НОВЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ, АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ И
ПРОТИВОПАЗИТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ**

А.А. Лашков, С.Е. Сотниченко, А.Г. Габдулхаков

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В.
Шубникова РАН, Москва*

Разработка инновационных лекарств с направленностью на мишень, характерную для конкретного типа опухоли или инфекции, заявлена в “Стратегия-2020” одной из первоочередных задач. В терапии этих заболеваний широкое применение находят лекарства, влияющие на процессы метаболизма нуклеиновых кислот. Фармакологически значимым ферментом метаболизма нуклеиновых кислот и свободных азотистых оснований является уридинфосфорилаза.

Методом рентгеноструктурного анализа авторами установлены пространственные структуры атомного разрешения комплексов уридинфосфорилазы *S.typhimurium* (StUPh) с 2,2'-ангидроуридином (ANU), ионами фосфата и калия (ID PDB: 3DPS, 3C74, 1Y1R, 3DDO, 3FWP). Выявлено место и характер связывания ANU с StUPh (ферментом-мишенью). Методом молекулярного докинга определена структура комплекса уридинфосфорилазы человека (HUPhI) с ANU и ионом фосфата. Установлены аминокислотные остатки HUPhI, связывающие ANU. Показаны различия ферментов HUPhI и StUPh в гидрофобной области сайта, связывающего пиримидиновый компонент ANU. Впервые установлена идентичность механизма ингибирования HUPhI и StUPh 2,2'-ангидроуридином. Исследована лабильность атомов молекул HUPhI, StUPh и комплекса StUPh с ионом калия методом молекулярной динамики. Выявлены отличия в подвижности элементов молекул StUPh и HUPhI. На основе ANU проведено конструирование *in silico* молекулы высокоафинного ингибитора для HUPhI и StUPh. Это 5-замещенные и 6-замещенные 2,2'-ангидроуридины, где в качестве заместителя выступает короткая алифатическая насыщенная цепочка с ароматической группой на конце.

Работа выполнена за счет средств базового бюджетного финансирования ИК РАН. Авторы благодарят в.н.с. ИКРАН Михайлова А.М. за предложенную тему исследования и научное руководство.

Лашков Александр Александрович
119333, Москва, ул. Ленинский просп., д. 59
Тел.: 8(903)2743802; E-mail: alashkov83@gmail.com

САМООРГАНИЗАЦИЯ ЗВЕЗДООБРАЗНЫХ ПОЛИМЕРОВ С ФУЛЛЕРЕНОВЫМ ЦЕНТРОМ ВЕТВЛЕНИЯ В РАСТВОРАХ ПО ДАННЫМ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

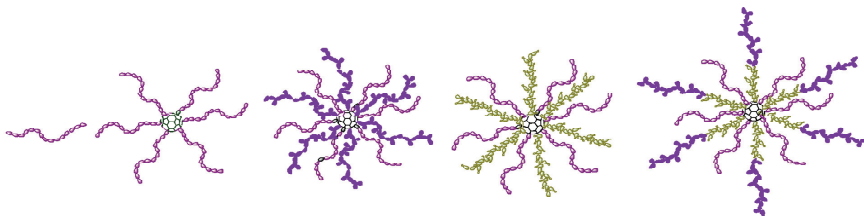
В.Т. Лебедев¹⁾, Gy Török²⁾, Л.В. Виноградова³⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, г. Гатчина Ленинградской обл.*

²⁾ *Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary*

³⁾ *Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург*

Представлен обзор нейтронных исследований процессов внутри и межмолекулярной самоорганизации звездообразных полимеров в растворах в диапазоне масштабов – от сегмента цепи, луча и единичной звезды до супрамолекулярных образований из звезд с одианарным и двойным центром ветвления из молекул фуллерена C_{60} , связанных ковалентно. Природа явлений упорядочения лучей (гомо-, блок-сополимеры), эффектов самоорганизации звезд в растворах изучена в зависимости от полярности растворителя и полимера, как для звезд с одним типом лучей, так и для гибридных объектов с полярными и неполярными лучами, привитыми к общему центру. Анализ данных рассеяния нейтронов с привлечением модели Бенуа, скейлинговых приближений Дауда-Коттона и Берштейн выявил особый характер структурирования звезд, в котором активная роль принадлежит C_{60} -центру, в значительной мере определяющему конформации звезд, их взаимодействия через потенциалы отталкивания при усилении эффекта исключенного объема за счет образования внутри звезд плотного экранирующего ядра из фуллерена и фрагментов лучей.



Работа поддержана РФФИ (грант 10-03-00191а) и Программой Президиума РАН № 21П.

Лебедев Василий Тимофеевич, д.ф.-м.н.

188300, г. Гатчина, Орлова Роща 1, ПИЯФ

Тел.: (81372)4-63-96; Факс: (81371)39023; E-mail: vlebedev@npni.spb.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ В ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ НУКЛЕОПРОТЕИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Д.В.Лебедев¹⁾, Ю.П.Гармай¹⁾, А.В.Швецов¹⁾, А.В.Илатовский¹⁾, М.В.Филатов¹⁾
М.Г.Петухов¹⁾, В.В.Исаев-Иванов¹⁾

¹⁾*Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

Методы нейтронного рассеяния позволяют получить информацию о структуре и динамике нуклеопротеидных комплексов и сложных биологических систем в широком диапазоне характерных размеров, при этом интерпретация полученных данных требует создания информативной модели изучаемых объектов.

Современные представления об иерархии упаковки ДНК в ядрах клеток эукариот, от нуклеосом до хромосом, основано в основном на наблюдениях объектов, которые при определенных условиях были изолированы из клеточного ядра. Ряд работ, в том числе результаты измерения распределения рассеивающей плотности в ядрах различных клеток методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), указывают на организацию нативного хроматина в структуры с фрактальной размерностью [1, 2, 3]. Нами предложена модель организации хроматина, описывающая фрактальные характеристики распределения рассеивающей плотности в ядре клетки, и позволяющая связать результаты измерений МУРН с интегральными параметрами структуры в широком диапазоне линейных размеров.

Развитие методов моделирования молекулярной динамики (МД) позволяет строить реалистичные модели поведения нуклеопротеидных комплексов размером до нескольких сотен килодальтон. Нами были получены МД траектории белков RecA из *E.coli* и *D. Radiodurans*, как в отсутствие субстрата, так и в комплексе с ДНК. Молекулярно-динамические модели белков RecA показывают наличие нескольких компонент движения в белковом мономере, коррелирующих с крупномасштабной подвижностью белкового филамента. Анализ МД траекторий позволяет интерпретировать данные МУРН с учетом полидисперсности рассеивающих объектов, вызванной их конформационными движениями, а также определить движения в белковом филаменте, потенциально имеющие функциональное значение, которые можно зарегистрировать методами световой корреляционной спектроскопии и нейтронного спин-эхо.

1. H. Yokota et al., *Cell Biol.*, **130**, 1239-1249 (1995).
2. A. Bancaud et al., *The EMBO Journal*, **28**, 3785–3798 (2009).
3. D.V. Lebedev et al., *FEBS Letters*, **579**, 1465-1468 (2005).

Лебедев Дмитрий Витальевич, с.н.с.

188300 г.Гатчина, Орлова Роща, ОМРБ ПИЯФ РАН

Тел.: (81371)46660; Факс: (81371)32303; E-mail: dtry@omrb.pnpi.spb.ru

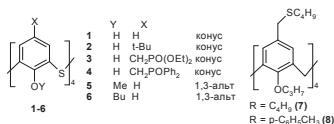
ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ТИАКАЛИКСАРЕНОВ И КАЛИКСАРЕНТИОЭФИРОВ

Л.Н.Мазалов¹⁾, Н.А.Крючкова¹⁾, В.Г.Торгов¹⁾, Г.А.Костин¹⁾, Е.В.Коротаев¹⁾,
А.Д.Федоренко¹⁾, Г.И.Семушкина¹⁾, В.И.Кальченко²⁾

¹⁾Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

²⁾Институт органической химии НАН Украины

Тиакаликсарены (ТКА) (рис. 1) являются новым классом макроциклических соединений, интенсивно исследуемых в последнее время. Введение



электронноакцепторных атомов серы вместо мостиковых CH₂-групп обуславливает существенные отличия ТКА от классических каликсаренов.

Рис. 1. Тиакаликс[4]арены 1-6 и каликс[4]арентиоэфир 7 и его производное 8

С точки зрения координационной химии наиболее принципиальным отличием ТКА является наличие дополнительных донорных центров – атомов серы. ТКА и продукты их окисления, дополнительно модифицированные S, PO, N – донорными группами в верхнем или нижнем ободах фактически являются бифункциональными экстрагентами и могут быть использованы при разработке новых процессов выделения и разделения металлов (в том числе и осколочных), а также в качестве синтетических рецепторов. Природа химической связи в этих супрамолекулярных комплексах металлов в значительной степени обусловлена зарядовым состоянием донорных атомов серы и кислорода и характером ВЗМО экстрагентов, сведения о которых в литературе отсутствуют.

Настоящая работа посвящена исследованию тиакаликс[4]аренов в различных конформациях («конус» и «1, 3-альтернат»), а также в каликс[4]арентиоэфиров (рис. 1) методами квантовой химии и рентгеновской спектроскопии позволяющими охарактеризовать распределение электронной плотности и характер молекулярных орбиталей.

По данным РФЭС и РЭС электронная плотность на атомах серы в тиакаликсаренах больше, чем в дифенилсульфиде, что связано с отсутствием сопряжения вследствие геометрических характеристик мостикового фрагмента Ar-S-Ar.

Мазалов Лев Николаевич, д.ф.-м.н., проф.
630090, Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 3
Тел.: (383)3306433; Факс: (383)3309489; e-mail: lm@niic.nsc.ru

БИОКРИСТАЛЛОМИКА ЧЕЛОВЕКА И ЖИВОТНЫХ КАК ОСНОВА ИННОВАЦИОННЫХ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ И ЛЕЧЕБНЫХ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

А.К. Мартусевич¹⁾, Н.Ф. Камакин²⁾, Ж.Г. Симонова²⁾, А.П. Русских³⁾

¹⁾Нижегородский НИИ травматологии и ортопедии, Нижний Новгород

²⁾Кировская государственная медицинская академия, Киров

³⁾Вятская государственная медицинская академия, Киров

Способность биологических жидкостей к спонтанной структуризации на подложке впервые в России описана в начале 70-х гг. XX века и с этого времени вызывает значительный интерес у специалистов медико-биологического профиля, связанный с поиском связи между особенностями формируемой биологическим субстратом картины и состоянием организма, от которого он был получен.

В данной работе систематизированы данные многолетних исследований авторов в указанной области и теоретические обобщения, позволившие с физиологических и физико-химических позиций предложить вариант объединения этих исследований в рамках общего направления – биокристалломики как науки о биогенной структуризации. Разработаны основные субнаправления биокристалломики (кристаллодиагностика, кристаллопатология, кристаллотропная терапия, фармакобиокристалломика и др.), ее методология и терминологический аппарат. Предложены, апробированы и систематизированы методические подходы к изучению кристаллогенных свойств биологических субстратов – основного объекта биокристалломных исследований. Данные технологии преимущественно базируются как на ранее применяемых в других областях науки (различные варианты микроскопии, спектрометрия, гравиметрия, термография), так и специально созданных для решения задач биокристалломики методах (изучение акустомеханического импеданса высыхающих капель и др.). Накопленные данные позволяют прогнозировать обширные перспективы биокристалломики в плане разработки новых технологий кристаллодиагностики патологии человека и животных, а также инновационных способов лечения.

Мартусевич Андрей Кимович, к.м.н.
610033, Киров, ул. Производственная, д. 6
Тел.: (909)1449182; E-mail: cryst-mart@yandex.ru

СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ФРУКТОЗО-1,6-БИСФОСФАТАЛЬДОЛАЗЫ КЛАССА I ИЗ *E. COLI*

Е.В. Родина^{1,3)}, А.В. Сазонов¹⁾, Н.Н. Воробьева¹⁾, С.А. Курилова²⁾, В.Р. Самыгина³⁾,
В.В. Волков³⁾, Э.В. Штыкова³⁾, К.А. Дембо³⁾, Л.А. Дадинова³⁾, Ю.В. Кобыльская³⁾,
M. Groves⁴⁾, V. Lamzin⁴⁾, Т.И. Назарова²⁾

¹⁾ Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

²⁾ НИИ Физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского МГУ

³⁾ Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН

⁴⁾ European Molecular Biology Laboratory, Hamburg Outstation

Фруктозо-1,6-бисфосфатальдолазы (Fba) – это фермент класса лиаз, который играет важную роль в гликолизе и глюконеогенезе. Помимо каталитической функции, Fba также выполняет роль белка-адаптора в образовании различных межбелковых комплексов. Исследование структуры и функции Fba имеет прикладное и медицинское значение. Объектом данного исследования является Fba класса I из *E. coli*, гомологичная эукариотическим Fba. Этот белок, нетипичный для бактерий, до сих пор практически не был охарактеризован. В данной работе были исследованы кинетические и структурные особенности Fba.

Функциональная характеристика: определены кинетические параметры фермента и их pH-зависимость. Охарактеризовано влияние на активность Fba различных физиологических факторов: ионов металла, органических анионов, других белков. Обнаружено взаимодействие между Fba и некоторыми белками клеточного лизата, например, неорганической пирофосфатазой (PPазой). Показано, что *in vitro* присутствие PPазы существенно увеличивает активность Fba и ее стабильность в условиях химической денатурации.

Структурная характеристика: впервые получена кристаллическая структура Fba класса I из *E. coli*. Методом малоуглового рассеяния построена молекулярная модель Fba в растворе в нативном виде и в комплексе с PPазой. Совместный анализ полученных данных позволяет предположить, что при образовании комплекса изменяется олигомерная структура Fba.

Родина Елена Валерьевна

119899, Москва, Воробьевы горы, д.1, стр. 40

Тел.: 8(495)9395362; Факс: 8(495)9393181; E-mail: rodina@belozersky.msu.ru

УПОРЯДОЧЕНИЕ БЕЛКА КОЛЛАГЕНА В КОМПОЗИТЕ С НАНОЧАСТИЦАМИ

А.В.Рыженков, Н.В.Классен

Институт физики твердого тела Российской Академии Наук.

Белковые кристаллы известны в кристаллографии с 20-х годов XX века. Исследование структуры подобных кристаллов необходимо для понимания свойств белков и функционирования живых систем, поможет в создании материалов с уникальными свойствами.

Известные способы получения белковых кристаллов связаны с прямым получением таких объектов из молекул белка. В своей работе мы предприняли попытку получить упорядоченную структуру из белка коллагена с использованием наночастиц двуокиси кремния и титаната бария.

Серию композитных материалов, необходимых для исследования, синтезировали из взятых в различных соотношениях водных растворов коллагена в концентрации 6% и коллоидных растворов наночастиц оксида кремния (IV), синтезированных гидролизом тетраэтоксисилана, размером ~47,3 нм и ~57,5 нм в концентрациях 2,7% и 3% соответственно. По результатам электронной микроскопии выявлена тенденция образовывать упорядоченные одноцепочечные протяженные структуры для частиц двуокиси кремния при возрастании концентрации коллагена в системе, оптическая микроскопия в этом случае выявила равномерную оптическую анизотропию полученного материала. При малых концентрациях коллагена наночастицы двуокиси кремния формируют отчетливые гексагональные структуры.

Материал, синтезированный из 1% раствора ~30нм частиц титаната бария и 6% раствора коллагена, продемонстрировал сильную очаговую оптическую анизотропию. По результатам электронной микроскопии наночастицы титаната бария формировали в коллагене агломераты.

Отдельные компоненты, служившими исходными материалами для создания композитов, не проявляли анизотропных свойств.

Рыженков Антон Владимирович, м.н.с.

142432 г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д. 2
Тел.: 8(910)2673681; E-mail: antonRzk@gmail.com

СВЯЗЬ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ МЕТАЛЛОКОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С УЧАСТИЕМ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА, СО СВОЙСТВАМИ ФЛЮИДА И МАТРИЦЫ

Э.Е. Саид-Галиев¹⁾, А.Ю. Николаев¹⁾, А.Р.Хохлов¹⁾, Э.В. Штыкова²⁾, В.В. Волков²⁾,
К.А. Дембо²⁾

¹⁾*Институт элементоорганических соединений РАН, Москва*

²⁾*Институт кристаллографии РАН, Москва*

Метод мало углового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) использован как основной в исследовании структурной организации металлокомплексов, полученных с участием сверхкритического диоксида углерода (СК СО₂). В работе на большом количестве примеров прослеживается связь между свойствами флюида, матрицы и структурой полученных композитов. Метод синтеза включает две стадии: импрегнацию (диффузию) СК СО₂ - растворов прекурсоров металлических частиц – металлоорганических комплексов в матрицу и далее восстановление металла термическим способом, либо химическим с дополнительным введением водорода. В качестве прекурсоров выбраны растворимые в СК СО₂ органические комплексы благородных и других (Cu, Ni) металлов, а в качестве матриц синтетические и природные полимеры, сажа, γ - Al₂ O₃, SiO₂. Имобилизованные в матрицах частицы металлов имеют наноразмерный характер (преимущественно от 1 до 40 нм). Профиль функции D_v(R) нанометаллокомпозита определяется для стеклообразных кристаллических полимерных, карбоновых и оксидных матриц структурой пор матрицы. Но для полимеров в высокоэластическом состоянии они могут не совпадать. Профиль функции D_v(R) зависит также от растворимости прекурсора в СК СО₂. Показано, что в композитах на основе аморфных полимеров (система Ag-поли-N-винилпирролидон) наночастицы металла имеют сферическую форму, а в системе Pd- полиарилат форму эллиптического цилиндра. Авторы благодарят О.Л. Лепендину за РФА анализ образцов, ОХНМ и Президиум Российской Академии наук (программы ОХ-6, ОХ-7 и П-21), Российский Фонд фундаментальных исследований (грант 11-03-01062-а) за финансовую поддержку.

Саид-Галиев Эрнест Ефимович

119991, Москва, ул. Вавилова, д. 28, ИНЭОС РАН

Тел.: 8(499)1350522; Факс: 8(499)1355085; E-mail: ernest@ineos.ac.ru

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ФОСФОПАНТЕТЕИН АДЕНИЛИЛТРАНСФЕРАЗЫ MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS В КОМПЛЕКСЕ С АТФ ПРИ РАЗРЕШЕНИИ 1.58 Å

В.И.Тимофеев¹⁾, Е.А.Смирнова¹⁾, Л.А.Чупова²⁾, Р.С.Есипов²⁾, И.П.Куранова¹⁾

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

²⁾ Институт биоорганической химии им.М.А. Шемакина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва

Бактериальные фосфопантетеин аденилилтрансферазы (PPAT) участвуют в пятистадийном биосинтезе кофермента А (CoA), катализируя предпоследнюю стадию его биосинтеза. CoA принимает участие в большом числе метаболических путей. Данные о пространственной структуре PPAT *Mt* с необходимы для понимания механизма функционирования данного фермента, а также, так как ингибирование синтеза CoA делает невозможным нормальную жизнедеятельность туберкулезной бактерии, для конструирования противотуберкулезных препаратов.

Рекомбинантный фермент, полученный в клетках *E.coli*, был очищен и закристаллизован методом встречной диффузии в капиллярах в условиях невесомости в оборудовании японского космического агентства JAXA, в экспериментальном модуле Kibo [1]. От выращенных кристаллов на синхротроне SPring-8 собран дифракционный набор до разрешения 1.58Å.

С использованием полученного набора методом молекулярного замещения решена структура PPAT *Mt* в комплексе с АТФ. Структура уточнена при разрешении 1.58 Å, R_f составил 0.1726, R_{free} – 0.2219. В структуре локализована молекула АТФ, описано взаимодействие АТФ с активным центром белка, проведено сравнение данного комплекса со структурой PPAT *Mt* в апо-форме и в комплексах с другими лигандами.

Работа выполнена при финансовой поддержке ЦНИИМаш Роскосмоса.

1. Tanaka, H., Inaka, K., Sugiyama, S., Takahashi, S., Sano, S., Sato, M., Yoshitomi, S.:

J. Synchrotron. Rad.(2004). 11, 45-48

Тимофеев Владимир Игоревич, м.н.с.

119333, Москва, Ленинский проспект, д.59

Тел.: 8(499)1356220; Факс: 8(499)1351011; E-mail: tostars@mail.ru

ПРИРОДА МЕЖФАЗНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В БИОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И РАЗЛИЧНЫХ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ

Д.А.Толмачев¹⁾, Н.В.Лукашева¹⁾, Ю.Г.Баклагина¹⁾, В.В. Ключковская²⁾, Д.П.Романов³⁾,
А.К.Хрипунов¹⁾, Е.Ф.Панарин Е.Ф.¹⁾

¹⁾*Институт Высокмолекулярных Соединений РАН, Санкт-Петербурге*

²⁾*Институт Кристаллографии РАН, Москва*

³⁾*Институт Химии Силикатов РАН, Санкт-Петербурге*

Исследования последних лет показали, что композиты, перспективные для этих целей могут быть получены путем смешивания водных суспензий предварительно синтезированных органического и минерального компонентов, а именно, бактериальной целлюлозы (БЦ.) и фосфатов кальция (ФК). В этом случае природа взаимодействий связывающих минеральную и органическую фазы не ясна.

Комплексом структурных методов: дифракционных, электронной микроскопии, а также компьютерного моделирования была изучена структура композитов, полученных путем агрегирования в водной суспензии синтетических фосфатов кальция (ФК) различной морфологии и состава и *Acetobacter xylinum* (ЦАХ), в качестве скаффолда. Показано, что кристаллиты ФК осаждаются на поверхностях нанопибрил ЦАХ, причем какая кристаллографическая плоскость ФК при этом оказывается контактирующей с поверхностью ЦАХ, зависит от морфологии ФК кристаллита. Для ФК с кристаллитами одной морфологии (пластинчатой формы), но представляющими собой смесь кристаллических фаз выявлена зависимость степени осаждения от типа фазы. Компьютерное моделирование межфазных областей ЦАХ и ФК показало, что их образование выгодно для всех рассмотренных кристаллических фаз ФК, но при этом деформация молекул ЦАХ между компонентами композитного материала отличается в зависимости от кристаллической фазы ФК. Основной вклад в энергию взаимодействия компонентов вносит электростатические взаимодействия.

Толмачев Дмитрий Алексеевич

199004, Санкт-Петербург, Биржевой проезд, д. 6

Тел: (812)3285601; Факс: (812)3286869; Email: dm_tolmach@pochta.ru

ФОРМИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА И ФЕРРОИНА С ПОЛИМЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ В ГЕЛЕ

Л.В.Хенкин, А.А.Новакова, Е.Е.Махаева, И.Е.Ребрин, А.И.Шишаков

Московский Государственный Университет им. Ломоносова, Москва

Комплексы металлов, встроенных в матрицу полимерных гелей, в последнее время представляют значительный интерес, поскольку при взаимодействии металлов с полимерными гелями могут образовываться органо-металлические гибриды с необычными свойствами. Такие системы находят широкое применение в медицине, катализе, используются в нелинейной оптике, фотохромных и фоторефрактивных системах, при создании нанofункциональных материалов.

В настоящей работе проведено исследование слабо-сшитых гелей полиметакриловой кислоты (ПМАК), которые инкубировались в течение недели в водных растворах хлорида двухвалентного железа и ферроина (комплекс Fe(II)-фенантролин). Взаимодействие иона железа с гелем ПМАК сопровождалось коллапсом геля (в 10-50 раз) [1]. Целью данной работы является определение механизма встраивания комплексов железа в сетку полимерного геля, анализ связей полимер-комплекс железа, а также валентного и спинового состояния катиона железа методом мессбауэровской спектроскопии.

Мессбауэровские исследования образцов проводились в диапазоне от 120К до 300К. Анализ мессбауэровских спектров замороженных водных растворов и гелей, инкубированных в этих растворах, убедительно показал, что ионы железа встраиваются в матрицу геля без изменения ближайшего окружения (без разрушения комплекса).

Для определения сил связи в соединениях были построены зависимости вероятности эффекта Мессбауэра от температуры, а также ширины мессбауэровских линий от температуры. Эти зависимости описаны на основе модели молекулярного кристалла. Резкое возрастание величины эффекта Мессбауэра в спектрах гелей, сдвиг температуры начала диффузионной подвижности позволяют говорить об образовании эффективной связи катион железа - функциональная группа ПМАК, причем сила связи больше при инкубации в растворе ферроина по сравнению с раствором хлорида железа.

1. Т.Е. Григорьев, К.Х. Нгуен, И.В. Скрябин, Е.Е. Махаева, А.Р. Хохлов. Формирование комплексов Fe²⁺-фенантролин в объеме гидрогеля // Высокомолекулярные соединения. Серия А, 2008, Т. 50, № 1, С. 83-90.

Хенкин Лев Вадимович, аспирант
119234, Москва, ул. Ленинские горы, д.1
Тел.: 8(495)9391226; E-mail: levkhenkin@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.П.Чайников¹⁾, А.Л.Бугаев¹⁾, М.А.Солдатов¹⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Наиболее распространенные на сегодняшний день препараты, используемые при проведении химиотерапии – это препараты, активным компонентом которых являются соединения платины. Механизм действия препаратов заключается в нарушении функций ДНК. Молекулы активного вещества препарата попадают в раковую клетку и взаимодействуют с ДНК, образуя внутрицепочечные и реже межцепочечные координационные «связи-сшивки» ДНК. Связи образуются между двумя нуклеотидами. Например, гуанин-гуанин. В результате нарушаются процессы транскрипции и репликации, что приводит к задержке клеточного цикла и апоптозу.

В работе исследовались два платиносодержащих препарата – цисплатин (cisplatin) и карбоплатин (carboplatin). На первом этапе были построены модели свободных молекул активного вещества цисплатина $Pt(NH_3)_2Cl_2$ и карбоплатина $C_6H_{12}N_2O_4Pt$. Моделирование проводилось с использованием программного комплекса ADF2009, в котором реализован метод геометрической оптимизации атомной структуры, основанный на теории функционала электронной плотности (международный термин DFT). Для полученных моделей была рассчитана ближняя тонкая структура спектров рентгеновского поглощения (международный термин XANES) вблизи L_3 -края Pt методом полного многократного рассеяния в маффин-тин приближении для формы потенциала (метод реализован в программном коде FEFF9.0) и методом конечных разностей для решения уравнения Шредингера (программный код FDM). На лабораторном спектрометре рентгеновского поглощения «Rigaku» (НОЦ «Наноразмерная структура вещества», Ростов-на-Дону) были получены экспериментальные спектры рентгеновского поглощения вблизи L_3 -края Pt. Так как тонкая структура спектров рентгеновского поглощения несет в себе информацию о локальной атомной структуре вблизи поглощающего атома, то из анализа и сравнения теории с экспериментом сделан вывод об адекватности полученных моделей свободных молекул. Второй этап работы заключался в моделировании процесса взаимодействия молекул цисплатина и карбоплатина с ДНК. В физической основе программ, используемых для компьютерного моделирования, лежали метод силовых полей, метод Хартри-Фока, теория функционала электронной плотности.

Чайников Александр Павлович
344103, Ростов-на-Дону, ул. 339 Стрелковой дивизии, д.1
Тел.: +79034856140; E-mail: chaynap@rambler.ru

САМООРГАНИЗУЮЩИЕСЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ РАЗЛИЧНОЙ СИММЕТРИИ НА ОСНОВЕ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СЕКТОРООБРАЗНЫХ ДЕНДРОНОВ

С.Н.Чвалун, М.А.Щербина, А.В.Бакиров

- ¹⁾ *Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва*
- ²⁾ *Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва*

Исследование общих закономерностей процессов самосборки и самоорганизации, основанных на молекулярном распознавании эндо- и экзорецепторов и спонтанном образовании функциональных надмолекулярных структур вследствие слабых нековалентных взаимодействий (ван-дер-ваальсовы и электростатические силы, водородные связи и т.п.), является одной из важнейших проблем современной науки о полимерах. Нами проведен сравнительный анализ фазового поведения дендронов нескольких поколений на основе галловой кислоты с различной длиной и строением алкильных окончаний, полимеров, к которым такие дендроны присоединены, а также дендронов на основе бензолсульфоновой кислоты с симметричным и несимметричным присоединением иона.

Обнаружено многообразие фаз, образованных такими соединениями: двумерные - упорядоченная и неупорядоченная гексагональная, моноклинная; трехмерные - кубические $Pm\bar{3}n$, $Im\bar{3}m$, бикотинюальная $Ia\bar{3}d$, тетрагональная. Такое многообразие, однако, подчиняется нескольким достаточно простым правилам. Для секторообразных монодендронов характерна упорядоченная колончатая фаза, которая при увеличении температуры переходит в неупорядоченную колончатую в кооперативном процессе, включающем последовательное "плавление" алифатических окончаний и мезогенных групп. Увеличение жесткости цилиндров колончатой фазы, например, за счет фторофобного эффекта приводит к термотропному переходу в трехмерную кубическую решетку за счет взаимной организации флуктуаций диаметра колонн. Конусообразные дендроны формируют сферические мицеллы, которые организуют обычно кубические фазы различной симметрии. В зависимости от степени полимеризации, полимеры с такими дендронами в качестве боковых заместителей образуют либо сферические мицеллы с неупорядоченной конформацией основной цепи, либо цилиндры.

Изученные материалы можно использовать для создания ион-селективных мембран, чувствительных сенсоров и актуаторов, создания нанотемплатов, и т.д. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 11-03-00669) и совета по грантам президента Российской Федерации (МК-4006.2010.3)

Чвалун Сергей Николаевич, д.х.н., зав.лаб.
123098, Москва, пл.Курчатова, д.1
Тел.: 8(916)7879995; E-mail: chvalun@cc.nifhi.ac.ru

ИЗУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ ПРОВОДИМОСТИ ИОННЫХ КАНАЛОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.К.Шайтан, М.А.Касимова, К.В. Шайтан

Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Ионные каналы — порообразующие белки, осуществляющие селективный транспорт ионов через мембраны всех живых клеток. В докладе обсуждается построение динамических моделей функционирования ионных каналов на основе трехмерных структур белков, полученных методами рентгеноструктурного анализа. Использование методов молекулярной динамики позволяет проводить исследования процессов ионной проводимости и механизмов активации/инактивации единичных ионных каналов, встроенных в модель фосфолипидной мембраны, при различных внешних условиях (концентрации ионов, напряженности электрического поля и т.д.). На примере бактериального калиевого канала KcsA (см. Рисунок), рассматриваются основные особенности работы калиевых ионных каналов. Обсуждаются особенности построения молекулярно динамических моделей на основе экспериментальных структур. Выявлены различные механизмы проведения ионов калия при различных напряжениях внешнего поля и концентрации ионов.

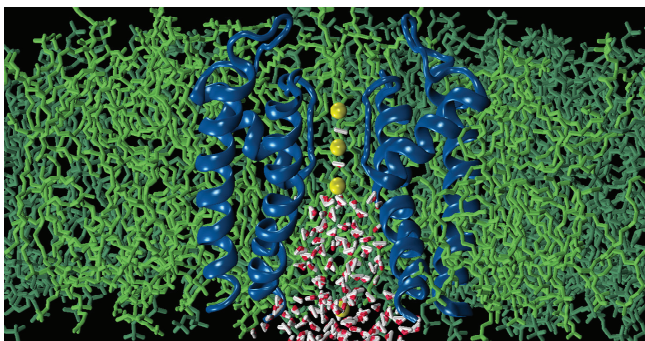


Рисунок: Калиевый канал KcsA в мембране ДПФХ. Калиевый канал изображен синим цветом, фосфолипиды – зеленым, ионы калия – желтым.

Шайтан Алексей Константинович, н.с.
19991, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова, д. 1, стр. 12
Тел.: 8(495)9395738; Факс: 8(495)9395738; E-mail: alex@molsim.org

СЕКЦИЯ I

Биомолекулярные структуры,
биосовместимые и органические
материалы

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ИЗМЕНЕНИЕ БИОСТРУКТУР ПРИ ДЕЙСТВИИ МЕЛАФЕНА

Алексеева О.М., Кривандин А.В., Шаталова О.В., Шибряева Л.С., Кременцова А.А.,
Миль.Е.М., Бинюков В.И., Голощапов А.Н., Бурлакова Е.Б.

Институт Биохимической физики РАН им. Н.М. Эммануэля

Приобретающий все более широкое применение стимулятор роста растений мелафен (меламиновое производное бисфосфиновой кислоты) был протестирован на биоструктурах животного происхождения для определения побочных воздействий при попадании в организм. В качестве моделей первичных мишеней на пути экзогенного вещества были использованы 1) липидные мембраны, образованные как индивидуальным искусственным фосфолипидом, так и смесью природных фосфолипидов; 2) протеолипосомы; 3) растворимый белок сыворотки крови; 4) эритроциты. Были использованы методы адиабатной дифференциальной микрокалориметрии, малоугловой рентгеновской дифракции, спектрального анализа и атомно-силовой микроскопии. Было показано, что водные растворы мелафена в концентрациях 10^{-11} М и выше меняют организацию микродоменов индивидуального нейтрального липида в чисто липидной мембране и разрыхляют глобулу растворимого белка. Практически неуязвимой оказалась структура природных фосфолипидных мембран, как чисто липидной, сбалансированной по заряду и стерически, так и белок-липидной мембраны, стабилизированной присутствием интегральных и поверхностных белков. Однако, при исследовании на функционально активной живой клетке – эритроцитах, было выявлено уменьшение периметра, высоты и объема имиджей эритроцитов, коррелирующее с изменением формы, что указывает на влияние мелафена на жизнедеятельность клеток. На основании полученных результатов сделаны выводы о существовании воздействия водных растворов мелафена в широком диапазоне концентраций на компоненты клеток животных.

Алексеева Ольга Михайловна, ст.н.с.
119334, Москва, ул. Косыгина, д.4
Тел.: (495)9397409; Факс: (499)1374107; E-mail: olgavek@yandex.ru

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ЭНДОНУКЛЕАЗЫ ИЗ *SERRATIA MARCESCENS* ПРИ СУБАТОМНОМ РАЗРЕШЕНИИ

В. В. Балаев, А. Г. Габдулхаков, Н. Е. Жухлистова, А. А. Лашков
Институт кристаллографии РАН, Москва

Все живые организмы содержат набор энзимов - нуклеаз, которые гидролизуют фосфодиэфирные связи в нуклеиновых кислотах. В зависимости от специфичности действия различают рибонуклеазы и дезоксирибонуклеазы. К группе неспецифичных эндо- и экзонуклеаз, действующих одновременно и на РНК, и на ДНК, относится высоко активная и химически стабильная эндонуклеаза *Sm*, выделенная из патогенной бактерии *Serratia marcescens*. Этот фермент катализирует расщепление 3'-фосфодиэфирных связей одно- и двухцепочечных ДНК и РНК с образованием моно-, ди-, три-, тетра-5'-фосфатнуклеотидов. По данным некоторых исследований нуклеаза *Sm* обладает противоопухолевыми и противовирусными свойствами, привлекает внимание биотехнологов. Нуклеаза *Sm* принадлежит к классу металловзависимых, но нет достаточной определенности в том, какая роль отводится двухвалентным ионам металлов, необходимым для ферментативной активности, также как понимания детального механизма гидролиза нуклеиновых кислот. В представляемой работе пространственное строение эндонуклеазы *Sm* было определено методом рентгеноструктурного анализа. Набор интенсивностей рентгеновских отражений (Гамбург, EMBL, DESY, станция XII, $t = 100\text{K}$) позволил определить структуру эндонуклеазы *Sm* при субатомном разрешении (0.99 \AA). Структура фермента уточнена программами Shelx и Phenix в анизотропном приближении ($R=0.125$, $R_{\text{free}}=0.141$, $\text{DPI}=0.023$, $\text{ME error}=0.023$). Субатомное разрешение позволило детально установить пространственную организацию биомолекулы, определить двойные положения аминокислотных остатков, лиганды, молекулы воды. Многие атомы водорода можно локализовать на разностных картах электронной плотности. Эндонуклеаза *Sm* представляет собой гомодимер, имеющий некристаллографическую ось симметрии 2-ого порядка. Два активных центра, находящиеся в желобах на поверхности каждой из субъединиц гомодимерной молекулы, значительно удалены друг от друга и функционируют асинхронно. Ведётся исследование структурно-функциональной взаимозависимости энзима.

Балаев Владислав Викторович, инженер
119333, Москва, Ленинский просп. 59, Институт кристаллографии РАН
Тел.: 8(499)135-54-20; E-mail: Vlad_Balaev@mail.ru

СИНХРОТРОННАЯ ДИАГНОСТИКА НАНОКОМПОЗИТОВ БИМЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ Au/ЦЕЛЛЮЛОЗА И Ag/ПОЛИКАПРОАМИД

О.А. Белякова^{1),2)}, А.В. Шуленина^{1),3)}, Я.В. Зубавичус^{1),2)}, А.А. Велигжанин¹⁾,
А.Ю.Васильков^{2),3)}

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

²⁾ *Институт элементоорганических соединений имени А.Н.Несмеянова РАН, Москва*

³⁾ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва*

Проведено структурное исследование образцов биосовместимых антибактериальных наноконпозитов медицинского назначения Au/целлюлоза (бинт) и Ag/поликапроамид (шовная нить). Данные образцы получены модификацией соответствующих матриц органоэолями Au и Ag, приготовленными металлопаровым синтезом. Образцы исследованы методами малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и рентгеноабсорбционной спектроскопии EXAFS/XANES с использованием синхротронного излучения на станции «Структурное материаловедение» Курчатовского источника СИ. Результаты EXAFS/XANES на К-крае серебра и L₃-крае золота однозначно указывают, что в обоих образцах присутствуют достаточно хорошо сформированные наночастицы металлов. Зарядовое состояние металлов близко к соответствующим объемным фазам, межатомные расстояния металл-металл также несущественно отличаются от объемных фаз. Оценка размеров и размерных распределений наночастиц в образцах была выполнена на основании данных МУРР. Оценка размеров Ag в образце Ag/поликапроамид по данным МУРР регистрирует асимметричное распределение с максимумом около 3.5 нм (радиус частиц), в случае образца Au/целлюлоза распределение имеет аналогичный вид, но с меньшими размерами: максимум распределения приходится на 2.6 нм.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Курчатовский институт» в рамках госконтракта 16.552.11.7003 при частичной поддержке РФФИ (проекты 11-03-00298 и 11-03-00820).

Белякова Ольга Алексеевна
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1
Тел.: (499)1967263; E-mail: olbelyak@gmail.com

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ГИГАНТСКИХ ПРОТЕОГЛИКАНОВЫХ СИСТЕМ СЛИЗИ И МЕЖКЛЕТОЧНОГО МАТРИКСА ЭПИТЕЛИАЛЬНЫХ ТКАНЕЙ

А.А.Васильева¹⁾, А.А.Вазина^{1,3)}, Н.Ф.Ланина¹⁾, В.Н.Корнеев²⁾, А.В.Забелин³⁾,
В.В.Степанова³⁾

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

²⁾ *Институт биофизики клетки РАН, Пущино*

³⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Целью работы было выявление наноструктурной стабильности протеогликановых систем из различных источников в широком диапазоне температур методом рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения. Три экспериментальных протокола были использованы при рентгендифракционных исследованиях протеогликановых систем: (1) исследования структуры интактных модифицированных желудочно-кишечных слизей млекопитающих и беспозвоночных (кальмара *Dosidicus gigas*); (2) исследование очищенных препаратов слизи свиньи (СИГМА); (3) исследование эпителиальных тканей шелковой гланды эндемического шелкопряда *Antheraea mylitta* в активном функциональном процессе продуцирования фиброина шелка - периоде спиннингования.

Экспериментально удалось показать два поразительных факта. *Первое* – наличие высокой упорядоченности протеогликановых систем, обусловленной регулярным прикреплением полисахаридных цепей к белковому кору с характерным периодом 4.5 нм. *Второе* – несмотря на большую вариабельность гликопротеинового состава слизей и межклеточного матрикса различных тканей, принцип структурной упорядоченности протеогликановых наночастиц инвариантен для всех типов тканей и муцинов в широком эволюционном ряду – от млекопитающих до беспозвоночных и насекомых. *Период 4.65 (± 0.15) нм является наноструктурным инвариантом гигантских протеогликановых молекул как слизей, так и межклеточного матрикса тканей.* Показана роль катионов и хелатов в обратимой структурной трансформации протеогликановых систем.

Установлено, что рентгенограммы протеогликанов слизи и межклеточного матрикса тканей остаются стабильными в широком диапазоне температур. Известно, что искусственные углевод-белковые образования более стабильны к нагреванию, денатурации и действию протеаз, чем соответствующие белки. Отсутствие структурных исследований протеогликановых систем является невосполнимым пробелом, тормозящим развитие биоинженерии, направленной на создание новых поколений лекарств.

Обсуждается наноструктурный механизм модификационной адаптации протеогликановых систем к изменению физико-химических параметров среды, в рамках теоретической физики сетчатых полимеров, термодинамические свойства которых крайне чувствительны к незначительным изменениям числа статистических шивок.

Работы выполняются при поддержке гранта РФФИ № 11-02-00706.

Васильева Анна Алексеевна

142290, Пущино, ул. Институтская, д.3

Тел.: (4967)739115; Факс: (4967)330553; E-mail: oliveant3@yahoo.com

МЕХАНОХИМИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И СВОЙСТВА МЕХАНОАКТИВИРОВАННОГО БИОАКТИВНОГО МОНОГИДРАТА ГЛЮКОНАТА КАЛЬЦИЯ

Е.В.Воронина¹⁾, Д.С.Рыбин¹⁾, Г.Н.Коньгин¹⁾, Е.П.Елсуков¹⁾, В.Е.Порсев¹⁾,
В.Ю.Петухов²⁾, Г.Г.Гумаров²⁾, Д.Р.Шарафутдинова³⁾

¹⁾ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

²⁾ *Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань*

³⁾ *Институт органической и физической химии КазНЦ РАН, Казань*

Ранее нами впервые была получена механохимически модифицированная нанодисперсная аморфная форма моногидрата глюконата кальция – механоактивированный глюконат кальция (МГК). Клинические исследования выявили ее неожиданно высокую терапевтическую эффективность при лечении заболеваний, связанных с нарушением обмена кальция в организме [1].

В настоящей работе проведены исследования МГК с применением методов ЯМР и ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии, ДСК, квантово-химических расчетов. На основе совокупности экспериментальных данных и первопринципных квантово-химических расчетов были сделаны выводы о возможности образования при механоактивации новых полиморфных модификаций молекулы исходного вещества и изменения в процессе механохимической обработки ее стереохимического строения. Структурные преобразования, происходящие в МГК при механоактивации, сопровождаются изменением химического состава первой координационной сферы кальция: имеет место распад кристаллогидрата - разрушение связей между молекулами координационной воды и ионом кальция; происходит перераспределение системы водородных и ковалентных, образованных по донорно-акцепторному механизму, связей. Показана необходимость исследования локальных характеристик структуры МГК методом EXAFS-спектроскопии.

1. Н.С.Стрелков, Г.Н.Коньгин и др., Альманах клинической медицины, 2008, т.XVII, ч.II, с.366-370.

Воронина Елена Валентиновна, д.ф.-м.н.
426000, Ижевск, ул.Кирова, д.132

Тел.: (3412)728775; Факс: (3412)722529; E-mail: voronina@fnms.fti.udm.ru

АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ НАНОЧАСТИЦ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ДНК, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ПРОЦЕССЕ ПОЛИМЕРАЗНОЙ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ

Р.В. Гайнутдинов²⁾, В. Н. Данилевич¹⁾

¹⁾ *Институт биоорганической химии им. академ. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва*

²⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

С помощью АСМ изучены образцы конденсированной ДНК, полученные при ПЦР-амплификации элемента IST2 с помощью Taq-полимеразы в условиях низкого фона. По данным ЭМ в образцах присутствовали ультратонкие диски овальной формы диаметром 3-5 мкм, значительное количество нанофиламентов и множество компактных наночастиц сферической и иной формы. Сканирование дисков и их отдельных участков с помощью зондового микроскопа P47-SPM-MDT (Россия, NT-MDT) (острие зонда с радиусом закругления около 2 нм) показало, что они состоят из переплетений жгутов сегментарного строения, состоящих из слипшихся наночастиц диаметром около 10 нм. Толщина отдельных дисков варьирует от 30 до 140 нм. Второй тип изученных структур – это нити (филаменты) из ДНК нанометровой толщины, длиной до нескольких мкм. Показано, что филаменты состоят из нескольких (до десятка) мельчайших нанофибрилл, их высота составляет ~2,2, а ширина ~15 нм. Из полученных данных следует, что они представляют собой плоские ленты, образованные, параллельно расположенными ДНК-спиралями. В изученных образцах было обнаружено также множество мельчайших наночастиц – наноточек. Статистическая обработка АСМ изображений с помощью специальной программы показала, что наноточки обладают достаточно высокой анизотропией - их длина в два раза превышает ширину. Наиболее характерные размеры наноточек: ширина – 8 нм, а длина – 12 нм. Наименьший размер наночастиц: ширина – 3 нм, а длина – 6 нм. Высота наноточек составляет около 1 или 2 нм. Предполагается, что наноточки являются элементарными наночастицами и представляют собой закрученные в спираль за счет Mg^{2+} -мостиков молекулы одноцепочечных ДНК. Обсуждаются молекулярные механизмы конденсации ДНК в ходе ПЦР.

Данилевич Василий Николаевич, с.н.с.
117997, Москва, ул.Миклухо-Маклая, 16/10
Тел.: 8(495)3364022; Факс: 8(495)3307301; E-mail: dan@ibch.ru

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ СКРИНИНГ ДЛЯ СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ БЕЛКОВ

М.А.Горбачева^{1),2)}, А.Г.Ярош¹⁾, Д.А.Корженевский¹⁾, А.К.Яковлев¹⁾,
П.В.Дороватовский¹⁾, Т.В.Ракитина¹⁾, А.В.Липкин¹⁾

¹⁾ НИЦ "Курчатовский институт", Москва, 123182, пл. Академика Курчатова, д. 1.

²⁾ Учреждение РАН Институт биохимии им. А.Н. Баха РАН, Москва, 119071, Ленинский проспект, д. 33. стр. 2

В последнее десятилетие, когда каждый год выходят сиквенсы десятков геномов и расшифровываются сотни новых пространственных структур макромолекул, всё более критичным становится отставание функциональных исследований белков. Белки с ещё не изученными функциями на сегодняшний день составляют 30-40% от общего количества белков, закодированных в любом бактериальном геноме, и даже больший процент в случае эукариотических геномов, включая геном человека. Поэтому развитие новых подходов к изучению белков с неизвестными функциями является актуальной научной задачей и имеет большое практическое значение.

Новый метод, названный кристаллографическим скринингом, будет использован для определения неизвестной функции и фармакологического потенциала белка с помощью изучения пространственной структуры самого белка и его комплексов с низкомолекулярными лигандами. Идентификации неизвестных лигандов будет проведена путём получения набора кристаллов для каждого из исследуемых белков, которые перед проведением рентгеноструктурного эксперимента будут проинкубированы с набором коктейлей, состоящих из смеси низкомолекулярных элементарных метаболитов, представляющих разные классы органических соединений: сахара, нуклеотиды и их производные, флавины, и тд. Метаболит наиболее похожий на эндогенный белковый лиганд с наибольшей вероятностью свяжется с закристаллизованным белком, и будет определён при обработке данных рентгеноструктурного анализа.

В настоящее время нами получены, выделены и очищены 15 бактериальных белков, предположительно способных связывать эндогенные лиганды. Проводится скрининг условий кристаллизации и кристаллографический скрининг метаболитов.

Горбачева Марина Анатольевна
123182 Москва, пл. Академика Курчатова, д.1
Тел.: 8(906)6955360; E-mail: lipus57@yahoo.com

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОКСИАПАТИТОВЫХ БИОАКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СТИМУЛЯЦИИ ОСТЕОГЕНЕЗА

В.Н.Горшенев¹⁾, Ю.А.Ершов²⁾, В.В.Колесов³⁾, Е.Д.Склянчук⁴⁾, А.Т.Телешев⁵⁾

¹⁾ *Институт биохимической физики РАН, Москва*

²⁾ *Московская медицинская академия им. Сеченова, Москва.*

³⁾ *Институт радиотехники и электроники РАН, Москва*

⁴⁾ *Дорожная клиническая больница им. Н.А. Семашко, Москва*

⁵⁾ *Московский педагогический государственный университет, Москва*

В настоящее время весьма актуальной является проблема разработки биоадекватных имплантатов для заполнения и восполнения костных дефектов, исследования биотрансформации коллаген-апатитовых нанокомпозитов *in vivo* и создания нанобиокомпозитов медицинского назначения для ортопедии. Кость- это природный композит, состоящий из органической и неорганической составляющей. Важнейшими органическими составляющими костной ткани являются коллаген и протеогликаны. Эти белки образуют межклеточный матрикс, в котором выстраиваются апатитовые структуры.

Общим из перечисленных направлений по созданию биоимплантатов является применение гидроксиапатита (ГАП) в качестве неорганической части костного имплантата. Поэтому одной из основных составляющих частей работы являлся синтез ГАП и исследование его свойств. Создание бионанокомпозитных материалов проводилось в условиях механоакустической обработки реакционной смеси при синтезе наночастиц гидроксиапатита непосредственно в коллагеновой матрице. Дисперсионная среда, в которой равномерно распределяется гидроксиапатит, представляет собой гидрогель с коллагеновой дисперсной фазой. Такая композиция является наиболее близкой по своему составу и свойствам к костной ткани организма человека и может быть положена в основу создания искусственного заменителя костной ткани.

Работа проводилась в рамках проекта РФФИ № 11-04-12178.

Горшенев Владимир Николаевич, с.н.с.
119334, Москва, ул. Косыгина, д.4
Тел.: 8(495)9397282; Факс: 8(495)1374101; E-mail: gor@sky.chph.ras.ru

ИММОБИЛИЗАЦИЯ ФЕРМЕНТАТИВНО СИНТЕЗИРОВАННОГО ПОЛИАНИЛИНА НА ДНК ДЛЯ АСМ-ДИАГНОСТИКИ МОРФОЛОГИИ КОМПЛЕКСА

Ю.В. Грищенко¹⁾, И.О.Майборода¹⁾, Ю.С. Зейфман¹⁾, Г.П. Шумакович²⁾,
М.Л. Занавескин¹⁾, А.Н. Марченков¹⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²⁾ Институт биохимии имени А.Н.Баха РАН, Москва

Молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) являются перспективными элементами биомолекулярных систем благодаря своим уникальным свойствам (в частности, возможности создания цепи любой длины с заданным порядком нуклеотидов). ДНК может выступать как самостоятельный конструкционный материал биогибридных систем, так и служить матрицей для формирования других элементов биоэлектроники. Так собственная проводимость ДНК невелика и, в общем, зависит от порядка нуклеотидов в цепи, поэтому необходимо либо химически модифицировать молекулу, либо добавлять к ней вещества, обладающие требуемыми свойствами электронных элементов. В качестве такого вещества для создания электропроводящих биокomпозитных материалов используют полианилин. Однако в настоящее время не изучен вопрос о влиянии параметров синтеза на равномерность образования покрытия полианилина на молекулах ДНК.

Благодаря своей высокой разрешающей способности, возможности проводить измерения на воздухе и в жидкости, изучать локальные физические свойства объектов метод атомно-силовой микроскопии (АСМ) открывает широкие возможности для исследования биологических макромолекул и их комплексов. Для исследования отдельных молекул ДНК с комплексом полианилина методом АСМ необходима методика создания препаратов на атомарно-гладких поверхностях. В работе проведено исследование по подбору концентрации буферных растворов ДНК и ДНК-полианилин для нанесения на атомарно-гладкую поверхность слюды и пирографита. Исходные молекулы ДНК служили калибровочным материалом при анализе особенностей покрытия цепей ДНК полианилином.

Грищенко Юлия Викторовна, м.н.с.
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1
Тел.: 8(499)1967784; E-mail: grishchenko.jv@gmail.com

РАСТРОВАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ (РЭМ) В ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ МИКРОЧАСТИЦ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ДНК

В. Н. Данилевич¹⁾, В.В. Артемов²⁾

¹⁾ *Институт биоорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва*

²⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Ранее описан феномен образования конденсированных форм ДНК (микро- и наночастиц) в ходе полимеразной цепной реакции (ПЦР). Микро- и наночастицы образуются на поздних стадиях ПЦР, в которой используются генспецифические или неполностью комплементарные олигонуклеотидные праймеры, а матрицей служит геномная ДНК микроорганизмов или плазмидные ДНК [13-16]. Для получения микрочастиц использовали термостабильную Taq-полимеразу и ее делеционный вариант - KlenTaq-полимеразу. Используя технику просвечивающей ЭМ, были выявлены различные морфотипы микрочастиц (около десяти), образующихся при ПЦР-амплификации различных фрагментов ДНК с помощью двух ДНК-полимераз. В настоящей работе морфология микрочастиц из ДНК была изучена с помощью сканирующего электронного микроскопа QUANTA 200 3D. Образцы для РЭМ готовили путем нанесения 5 μ l водной суспензии микрочастиц на медные сеточки с полимерной гидрофобной подложкой. Были исследованы микро- и наночастицы, полученные в различных условиях: в ходе стандартной и асимметричной ПЦР, в присутствии добавок катионов Mn^{2+} , Co^{2+} и т. д. При электронном сканировании образцов показано, что микрочастицы имеют фрактальную структуру, они состоят из большого числа дисков и сегментов дисков нанометровой толщины, определенным образом организованных в трехмерные частицы в форме сфер или эллипсоидов. Микрочастицы имеют развитую поверхность и могут быть хорошими сорбентами для красителей-интеркаляторов, в том числе тех, которые используются в медицинской практике. У части образцов выявлено большое количество одиночных дисков микронного диаметра и нанометровой толщины.

Данилевич Василий Николаевич, с.н.с.
117997, Москва, ул.Миклухо-Маклая, 16/10
Тел.: 8(495)3364022; Факс: 8(495)3307301; E-mail: dan@ibch.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЦИТОХРОМА С

А.А.Дорошева¹⁾, А.В.Солдатов¹⁾, В.Л.Мазалова¹⁾

¹⁾ Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

В настоящей работе представлены результаты теоретического исследования спектров рентгеновского поглощения XANES молекулы цитохрома С, а также влияние изменения положения атома железа относительно плоскости гема на спектры рентгеновского поглощения за К-краем железа. Были промоделированы различные случаи смещения атома железа относительно плоскости гема.

Анализ полученных результатов показывает чувствительность методики к структурным изменениям положения активного центра молекулы цитохрома С относительно плоскости гема.

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ МОЧЕВЫХ КАМНЕЙ У ДЕТЕЙ

Р.М. Закалюкин¹⁾, А.М. Мазо²⁾, А.Н. Цыгин²⁾, А.В. Акопян²⁾, С.Н. Зоркин²⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.М. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Научный центр здоровья детей РАМН, Москва*

Изучена серия камней почек, мочеточников и мочевого пузыря у детей методом рентгенфазового анализа (дифрактометр с графитовым монохроматором Shimadzu XRD – 6000). Идентификация кристаллической составляющей конкремента проводилась с помощью компьютерной базы данных JCPDS. Было исследовано 42 образца камней от 42 пациентов, полученных в основном путем дистанционной литотрипсии. Мочевые камни преимущественно имели одно- и двухфазный состав камней и состояли из оксалатов кальция (табл. 1).

Таблица 1

Минералогический состав мочевых камней у детей, n=42

Однофазовые 47,6%	Двухфазовые 38,1%	Трехфазовые 14,3%
Вевеллит — 5 $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	Вевеллит + ведделлит - 3	Вевеллит + ведделлит + 10% моч. к-ты -1
Ведделлит — 3 $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Ведделлит + 5% вевеллит - 3	Вевеллит + ведделлит + апатит-1
Апатит — 7 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$	Вевеллит + 5% ведделлит - 3	Ведделлит + 5% вевеллита и моч. к-ты- 1
L-цистин — 2 [$-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$] ₂	Вевеллит + 5% моч. К-ты - 4	Дигидрат моч. к-ты + 5% моч. к-ты и вевеллита-1
Дигидрат моч. К-ты — 1 $\text{C}_5\text{H}_4\text{O}_3\text{N}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Ведделлит + 5% моч. к-ты - 2	Дигидрат моч. к-ты + гидрогенурат аммония + вевеллит -1
Мочевая к-та -1 $\text{C}_5\text{H}_4\text{O}_3\text{N}_4$	Апатит + 5% вевеллита - 1	L-цистина + 5% вевеллита и ведделлита-1
Струвит — 1 $\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	-	-

Обращает на себя внимание, что 21% камней состоял из оксалатного ядра и оболочки из мочевой кислоты. Другие камни такой оболочки не имели. Наиболее травматический эффект вызывали кристаллы цистина.

Закалюкин Руслан Михайлович, к.х.н.

119333, Москва, Ленинский пр-т 59

Тел.: 8(495)330-81-56; Факс: 8(495)330-81-56; E-mail: ruslan@ns.crys.ras.ru

ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ СИНТЕЗ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ БИОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ДНК И ПОИАНИЛИНА

Ю.С.Зейфман¹⁾, Г.П.Шумакович²⁾, И.О.Майборода¹⁾, Ю.В.Грищенко¹⁾

¹⁾ НИЦ Курчатовский институт, Москва, 123182, пл. Академика Курчатова, д. 1

²⁾ Учреждение РАН Институт биохимии имени А.Н.Баха РАН, Москва, 119071, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

Молекулы ДНК являются уникальными строительными блоками для создания наноматериалов и молекулярных электрических схем за счёт комплементарности взаимодействий между ними, которая, с одной стороны, способствует их самоорганизации, а с другой позволяет получать структуры с достаточно высокой сложностью. Однако сами молекулы ДНК не обладают электронной проводимостью, что обуславливает интерес к созданию электропроводящих биокomпозитных материалов на основе ДНК. Одним из способов получения таких материалов является синтез электропроводящего полимера, например, полианилина, на матрице ДНК.

Были синтезированы интерполимерные комплексы ДНК-полианилин с использованием двух различных ферментов, пероксидазы из корней хрена и биомиметика – микропероксидазы-11, в качестве катализаторов окислительной полимеризации анилина. Исследованы зависимости оптических характеристик получаемых биокomпозитов от условий проведения реакции. Полученные образцы были детально охарактеризованы методами оптической спектроскопии, кругового дихроизма, ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье, а также методами зондовой микроскопии. Показано, что в зависимости от природы биокатализатора на матрице ДНК синтезируется электропроводящий полианилин, имеющий различную оптическую активность.

Зейфман Юлия Сергеевна
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1
Тел.: 8(926)8332259; E-mail: yulia.zeifman@gmail.com

СТРУКТУРА КОЛЬЦЕВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СФЕРОЛИТОВ: ИССЛЕДОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ МИКРОФУКУСНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФФРАКЦИИ

Д.А. Иванов¹⁾, М. Розенталь¹⁾, М. Бургхаммер²⁾

¹⁾ *Institut de Sciences des Matériaux de Mulhouse, CNRS LRC 7228, France*

²⁾ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Первые структурные исследования кольцевых полимерных сферолитов с помощью поляризационной оптической микроскопии относятся к классике полимерной физики и датируются серединой 50х годов прошлого века. Эти исследования позволили прояснить основные черты этой часто встречаемой морфологии, характеризующейся дальним порядком. В частности, практически сразу было установлено что сферолитические кольца, наблюдаемые оптически, соответствуют спиралевидному закручиванию ламеллярных кристаллов. Однако несмотря на достаточно сложный анализ поляризационных микрофотографий, разработанный для анализа трехмерной формы ламеллярных кристаллов, многие важные вопросы остались открыты. Так, вопрос о причине закручивания кристаллов до сих пор активно обсуждается в литературе. Более того, до сих пор оставалось непонятно, какова точная форма ламелл (например, спирали или геликоиды), и растут ли кристаллы при постоянной или скачкообразно меняющейся угловой скорости закручивания. Очевидно, что оптические методы исследования не позволяют ответить на этот комплекс важных вопросов а значит полностью понять природу этого интересного явления.

Возникновение методики микрофокусной диффракции позволило получить рентгеновские пучки с латеральным размером много меньше периода завитки полимерных кристаллов и снова вернуться к этой классической тематике полимерной физики. Новая методика не только позволяет определить основные параметры кольцевых сферолитов, такие как направление быстрого роста кристаллов и хиральность геликоидов [1], но также угловую скорость закручивания, детали кристаллографии ламелл, например угол наклона кристаллических цепей к нормали к ламеллярной поверхности, и в общем случае восстановить точную трехмерную форму ламелл [2].

1. V.A. Luchnikov, D.A. Ivanov, *Journ. Appl. Crystal.* **2009**, 42, 673-680; b) V.A. Luchnikov, D.A. Ivanov, *Journ. Appl. Crystal.* **2010**, 43, 578-586.

2. M. Rosenthal, D.V. Anokhin, V.A. Luchnikov, R.J. Davies, C. Riekel, M. Burghammer, G. Bar, D.A. Ivanov, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, **2010**, 14, 012014.

Дмитрий Анатольевич Иванов, профессор
Jean Starcky, 15, F-68057 Mulhouse, FRANCE
Тел.: +33 3 89 60 88 07; Факс: +33 3 89 60 87 99; E-mail: dimitri.ivanov@uha.fr

ИССЛЕДОВАНИЕ НОЦИЦЕПТИВНЫХ РЕАКЦИЙ КРЫС В ТЕСТЕ ГОРЯЧАЯ ПЛАСТИНА ПОСЛЕ ВНУТРИБРЮШИННОГО ВЕДЕНИЯ Фуллеренов

В.В.Казбанов¹⁾, Л.Э.Рожнова¹⁾, Г.П.Миროнова¹⁾, А.Г.Солдатов²⁾, С.Г.Пашкевич¹⁾

¹⁾*Институт физиологии НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

²⁾*Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

Добавки фуллеренов используют для роста алмазных пленок, что актуально в аспекте изучения экологической безопасности имплантатов с алмазоподобными покрытиями. Сотрудниками Института физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси разработаны фуллерены различных химических композиций C60(Me(CpR1)(CpR2))₂: №1 CF-5 (Me-Fe, R1-H, R2- H); №2 CN-5 (Me- Ni, R1-H, R2- H); №3 CDBF-4 (Me-Fe, R1- C6H5CO, R2- C6H5CO); №4 CDBN-4 (Me- Ni, R1- C6H5CO, R2- C6H5CO); №5 CFe1-3 (Me-Fe, R1- CH3CO, R2- CCl2=CCLCH2CO); №6 CFe2-3 (Me-Fe, R1- CCl2=CCLCH2CO, R2- CCl2=CCLCH2CO); №7 CFe3-3 (Me-Fe, R1- H, R2- CCl2=CCLCH2CO). В работе акцентировали внимание на исследовании особенностей реализации защитных (ноцицептивных) реакций в тесте «горячая пластина» (T=55°C) после попадания перечисленных в таблице фуллеренов в организм крыс.

Исследования проводили на белых крысах (n=40) массой 280-380 г. Семи группам (n=5) вводили фуллерены (№1-7 указаны в таблице), взвесив в апиригенном 0.9% NaCl в объеме 0,2 мл однократно внутрибрюшинно. Контрольным животным (n=5) вводили NaCl в аналогичном объеме. Латентный период ноцицептивной реакции (вылизывание задней лапы, ЛПНР) регистрировали через 1 и 5 сут. Только в группе крыс, которым вводили фуллерены №6 на 5 сут зарегистрировано достоверное увеличение ЛПНР (с 10,9±0,9 с до 16,01±0,3 с), что свидетельствует о развитии гипоалгезии. Отмечены изменения в желудочно-кишечном тракте: вздутие, накопление газовых пузырьков на уровне разных отделов тонкого и толстого кишечника при введении фуллеренов №5 и №7, локальное слипание и хаотичное распределение частиц №7 на селезенке, кишечнике, в брыжейке.

Таким образом, фуллерен CFe2-3 (№6) весьма перспективен для дальнейшего исследования возможностей его использования в качестве препарата для развития анальгетических эффектов.

Казбанов Владимир Владимирович
220136, Минск, ул. Одинцова, д.113,
Тел.: 375(17)2842458; Факс: 375(17)2842458; E-mail: Vladimir_by@mail.ru

ВОЗМОЖНОСТИ КРИСТАЛЛОСАЛИВАДИАГНОСТИКИ: РЕАЛЬНОСТЬ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Н.Ф. Камакин¹⁾, А.К. Мартусевич²⁾, Ж.Г. Симонова¹⁾, О.И. Шубина¹⁾

¹⁾ *Кировская государственная медицинская академия, Киров*

²⁾ *Нижегородский НИИ травматологии и ортопедии, Нижний Новгород*

Целью работы явилось раскрытие возможностей биофизических методов в оценке физико-химических особенностей слюны по ее способности к дегидратационной самоорганизации.

На протяжении последних 5 лет нами производилось испытание ряда биофизических технологий в плане расширения методического аппарата биокристалломики в отношении слюны, некоторые из которых исходно разрабатывались для исследования процессов дегидратации (Институт прикладной физики РАН), тогда как другие первоначально созданы для решения иных задач. В спектр изученных технологий входят: регистрация акустомеханического импеданса высыхающих капель слюны, спектрометрия и ИК-спектроскопия фаций, их термография, биограмметрия, протеограмметрия, лазерная флуометрия биологических жидкостей и др.

Нами установлены особенности кристаллогенных свойств слюны в норме и при различной патологии желудочно-кишечного тракта (более 120 пациентов с хроническим гастритом, язвенной болезнью желудка и двенадцатиперстной кишки, хроническим панкреатитом и др.). Установлено, что изучаемая биологическая среда практически здоровых людей вследствие особого компонентного состава и физико-химических свойств обнаруживает специфические особенности структурообразования. В условиях патологии кристаллостаз слюны приобретает патологический характер: в фазе обострения язвенной болезни происходит активация кристаллогенных свойств биожидкости, при обострении хронического гастрита – снижение их выраженности, тогда как обострение хронического панкреатита обуславливает менее выраженные изменения.

Камакин Николай Федорович, д.м.н., профессор
610033, Киров, ул. Московская, д. 112
Тел.: (8332)382151; E-mail: cryst-mart@yandex.ru

РЕНТГЕНОВСКОЕ ДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛИПИДНЫХ ПЛЁНОК С АНТИОКСИДАНТОМ ИХФАН-10

А.В. Кривандин, О.В. Шаталова, Л.Д. Фаткуллина, А.Н. Голощапов,
Е.Б. Бурлакова

*Учреждение Российской академии наук
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва*

Ихфаны – это синтезированные в ИБХФ РАН гибридные амфифильные антиоксиданты нового класса, молекулы которых содержат фрагменты, обеспечивающие антиоксидантную и антихолинэстеразную активности. Благодаря такому сочетанию свойств эти антиоксиданты могут стать эффективными средствами лечения когнитивных нарушений у пожилых людей, в том числе и болезни Альцгеймера. С целью изучения возможности встраивания ихфанов в липидные мембраны была исследована структура многослойных плёнок, полученных из растворов яичного фосфатидилхолина и ихфана-10 в хлороформе. Содержание ихфана составляло 12.5 и 32% от веса липидов. Измерение дифрактограмм проводили на дифрактометре HZG4 по методу Брэгга-Брентано (излучение $\text{CuK}\alpha$) при разной степени гидратации плёнок. Воздушно-сухие плёнки были многофазными и помимо липидной фазы содержали кристаллическую фазу ихфана. При увеличении степени гидратации плёнок в результате выдерживания их в парах воды плёнки становились однофазными и состояли из ламеллярной фазы с меньшим значением периода, чем в случае плёнок, полученных из фосфатидилхолина без ихфана. Сравнение профилей электронной плотности липидных мембран в плёнках, образованных одним фосфатидилхолином и фосфатидилхолином с ихфаном, свидетельствует о способности ихфана встраиваться в липидные мембраны. Это свойство ихфана может быть использовано при разработке лекарственных средств на основе липосом, содержащих ихфан. Возможность ихфана встраиваться в биологические мембраны следует учитывать при изучении механизмов его действия *in vivo*.

Кривандин Алексей Владимирович
119334, Москва, ул. Косыгина, 4, ИБХФ РАН
Тел.: 8(495)9397324; Факс: 8(499)1374101; E-mail: a.krivandin@sky.chph.ras.ru

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА ПОЛИМЕРНЫХ ГИДРОГЕЛЯХ, ОБЛАДАЮЩИХ ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ, ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Ю.В.Кульвелис¹⁾, В.Т.Лебедев¹⁾, В.А.Трунов¹⁾, В.Н.Павлюченко²⁾, С.С.Иванчев²⁾,
О.Н.Примаченко²⁾, С.Я.Хайкин²⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

²⁾ *Санкт-Петербургский филиал Института катализа СО РАН*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы новые полимерные гидрогели, синтезированные на основе 2-гидроксиэтилметакрилата, с различными функциональными ионогенными группами. Такие гидрогели, насыщенные лекарственными веществами, могут быть использованы в качестве мягких контактных линз (МКЛ) при лечении офтальмологических заболеваний. Для увеличения специфического связывания синтез полимера проводят в присутствии лекарственного вещества, экстрагируемого после синтеза, получая, так называемые, «imprinted» гидрогели. Формируемая нанопористая структура гидрогеля приводит к увеличению сорбционной емкости гидрогеля и более медленному высвобождению лекарства, то есть, к эффекту памяти гидрогеля по отношению к лекарственному веществу. Синтез исследованных гидрогелей был проведен в отсутствии или присутствии целевого лекарственного вещества – антибиотика цефазолина. Установлена связь эффекта памяти при иммобилизации цефазолина при синтезе с внутренним строением гидрогелей, в зависимости от их состава и типа функциональных групп. Показаны различия в структуре гидрогелей с анионными, катионными и амфифильными функциональными группами и связь структуры со способностью гидрогелей к влагопоглощению.

Кульвелис Юрий Викторович, н.с.
188300, Ленинградская обл., Гатчина, Орлова Роща, ПИЯФ РАН
Тел.: (81371)46396; Факс: (81371)39023; E-mail: kulvelis@npfi.spb.ru

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КАРБОКСИПЕПТИДАЗЫ Т (КПТ) ИЗ *THERMOACTYROMYCES VULGARIS* И ЕЕ МУТАНТНОЙ ФОРМЫ

И.П.Куранова¹⁾, В.Х.Акпаров²⁾, В.И.Тимофеев¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов, Москва*

Карбоксипептидазы катализируют отщепление С-концевого аминокислотного остатка от белков и пептидов. Карбоксипептидаза Т (КПТ), в отличие от карбоксипептидазы В (КПВ), отщепляет как гидрофобные, так и положительно заряженные остатки. С целью изучения структурных основ специфичности была сконструирована мутантная форма КПТ, в которой карман первичной специфичности был заменен на его аналог в КПВ. Рекомбинантная КПТ и ее мутантная форма, были закристаллизованы методом встречной диффузии в капиллярах в наземных условиях и в условиях невесомости в оборудовании японского космического агентства JAXA [1]. От выращенных кристаллов на синхротроне SPring-8 собран дифракционный набор до разрешения 1.5 Å для дикого типа и 1.6 Å для мутантной формы КПТ. С использованием полученных наборов методом молекулярного замещения решены структуры КПТ и ее мутантной формы. Структура дикого типа уточнена при разрешении 1.69 Å; R_f – 0.1690, R_{free} – 0.1816, мутантной формы – при 1.66 Å, R_f – 0.1694, R_{free} – 0.1875. Координаты моделей депонированы в Protein Data Bank (PDB ID: 3QNV для дикого типа и 3PRT для мутантной формы). Проведено сравнение полученных структур с решенной ранее структурой КПТ с ионами кальция.

Работа выполнена при финансовой поддержке ЦНИИМаш Роскосмоса и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-04-01541-а).

1. Tanaka, H., Inaka, K., Sugiyama, S., Takahashi, S., Sano, S., Sato, M., Yoshitomi, S.: J. Synchrotron. Rad.(2004). 11, 45-48

Куранова Инна Петровна, г. н. с.

119333, Москва, Ленинский проспект, д.59

Тел.: 8(499)1356220; Факс: 8(499)1351011; E-mail: inna@ns.crys.ras.ru

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ПРИРОДНЫХ И БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЙ ШЕЛКА

Н.Ф.Ланина¹⁾, А.А.Вазина^{1,2)}, А.А.Васильева¹⁾, В.Н.Корнеев³⁾, А.В.Забелин²⁾,
В.В.Степанова²⁾, Т.А.Куприянова⁴⁾, А.А.Легкодымов⁵⁾, С.Ч.Кунду⁶⁾

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *Институт биофизики клетки РАН, Пущино*

⁴⁾ *Институт неорганической химии им. Н.С.Курнакова РАН, Москва*

⁵⁾ *Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера СО РАН, Новосибирск*

⁶⁾ *Индийский институт технологий, Отделение биотехнологии, Хварагпур*

Целью работы было выяснение принципов атомной и наноструктурной организации уникальных конструкций шелка, локализованных вне клетки и даже вне организма и поэтому функционирующих в широком диапазоне изменений биологических, физических и химических условий окружающей среды. Нами была создана коллекция около 200 образцов разных функциональных конструкций шелка, формирующихся в процессе жизненного цикла внутри и вне организма эндемического шелкопряда *Antheraea mylitta*. В коллекцию включены текстильные образцы шелковых тканей и нитей, а также разработанные ранее одиннадцать типов трехмерных биоинженерных конструкций (скефолдов), обладающих способностью поддерживать рост и пролиферацию клеток в клеточных культурах.

В структурных исследованиях широкого спектра конструкций белков шелка использованы методы рентгеновской дифракции под большими и малыми углами и рентгеновской флуоресценции на основе синхротронного излучения. Для различных конструкций шелка предложены морфологические наноструктурные модели, сформированные высоко упорядоченными молекулярными доменами (кристаллитами) – пачками полипептидных цепей, образующих классические бетаслои; упаковка кристаллитов может меняться от линейной до хаотической; рассматривается специфическая роль различных элементов.

Проведены измерения механических параметров различных конструкций природного шелка; показано, что термодинамические характеристики могут различаться на несколько порядков. Обсуждается оригинальная идея, рассматривающая природные конструкции шелка как гетерофазные системы с когерентными границами, в которых фиброин шелка играет роль и матрицы, и армирующего вещества, проявляя широкий спектр изменений структурно-физических свойств, присущих композитным материалам. Биотехнологические конструкции на основе природного шелка в силу его высокой прочности, биосовместимости и биodeградируемости, могут быть уникальным материалом, пригодным для биотехнологических и медицинских целей.

Работы выполняются при поддержке грантов РФФИ № 09-04-92663_ИНД и 11-02-00706.

Ланина Надежда Федоровна

142290, Пущино, ул. Институтская, д.3

Тел.: (4967)739199; Факс: (4967)330553; E-mail: lanina@mail.ru

НАНОСТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭПИТЕЛИАЛЬНЫХ ТКАНЕЙ ПРИ ОНКОЛОГИЧЕСКОЙ ПАТОЛОГИИ

Е.И.Маевский¹⁾, В.М.Аульченко³⁾, А.А.Вазина^{1,2)}, А.В.Забелин²⁾, В.Н.Корнеев⁴⁾,
Г.Н.Кулипанов³⁾, Т.А.Курпряннова⁵⁾, Н.Ф.Ланина¹⁾, В.П.Летягин⁶⁾, В.В.Степанова²⁾,
В.Г.Станкевич²⁾, Б.П.Толочко⁷⁾, М.П.Шарафутдинов⁷⁾

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

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

⁴⁾ *Институт биофизики клетки РАН, Пущино*

⁵⁾ *Институт неорганической химии им. Н.С.Курнакова РАН, Москва*

⁶⁾ *Российский онкологический научный центр им. Н.Н.Блохина РАМН, Москва*

⁷⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Целью работы было исследование наноструктурной трансформации протеогликановых систем межклеточного матрикса эпителиальных тканей на разных этапах прогрессии опухоли – инвазии и метастазирования (размножения и выноса за пределы первичного очага малигнизированных клеток). Отличительной особенностью протеогликановых систем, как было нами показано ранее, является наличие высокой наноструктурной упорядоченности, обусловленной регулярным прикреплением полисахаридных цепей к белковому кору с характерным периодом $4.65 (\pm 0.15) \text{ нм}$ [A. Vazina et al., *Nucl.Instr.Meth.* 2005, A543, 297; 2009, A603, 90], который является наноструктурным инвариантом протеогликанов как слизи, так и межклеточного матрикса тканей.

Проведены рентгендифракционные и флуоресцентные исследования эпителиальных тканей молочной железы и дыхательного тракта при онкологической патологии. Оказалось, что в онко-трансформированных тканях не соблюдается закон сохранения интегральной интенсивности рассеяния: обнаружено значительное увеличение интенсивности, обусловленной рассеянием от протеогликановых систем. Показана корреляция между элементарным составом и интегральной интенсивностью дифракционных рефлексов. Обнаружено многократное, до 200 раз, увеличение концентрации кальция. На ранних этапах прогрессии опухоли под действием хелатирующих агентов выявлены обратимые изменения интенсивности дискретных рефлексов без изменения интенсивности диффузного малоуглового рассеяния, что обусловлено, по-видимому, обратимым изменением электронной плотности только протеогликановых систем. Финальная стадия патологии характеризуется драматическим изменением дифракционной картины: наблюдается резкое увеличение интенсивности малоуглового диффузного рассеяния, дискретные рефлексы вообще не регистрируются. Обработка ткани хелатирующими агентами в этой стадии оказывается неэффективной. Деструкция протеогликановых систем может быть связана с ослаблением клеточной адгезии, что повышает вероятность того, что мутантные клетки выйдут из тканевого плена и будут свободно мигрировать в организме. Проникновение канцерогенно-трансформированных клеток в другие ткани вызывает взрыв метастазирования.

Обсуждается использование дифракционных картин и спектра элементного содержания ткани в качестве биомаркеров для диагностических и терапевтических целей.

Работы выполняются при поддержке гранта РФФИ № 11-02-00706.

Маевский Евгений Ильич, профессор

142290, Пущино, ул. Институтская, д.3

Тел.: (4967)739251; Факс: (4967)330553; E-mail: eim1@rambler.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ СУПЕРОКСИДИСМУТАЗЫ

В.Л.Мазалова, А. Л. Бугаев, А.В.Солдатов

Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

Работа посвящена теоретическому анализу рентгеновских спектров поглощения и определению 3D локальной атомной и электронной структуры различных типов CuZn-супероксиддисмутазы на основе разработанного метода теоретического "ab initio" анализа. Хотя определение координационного окружения атома металла в металлоферментах стандартными методами сильно затруднено, решение этой задачи крайне важно, так как биологическая функция металлоферментов, как правило, связана со структурными характеристиками активного металлического центра. Поэтому, одной из важнейших задач молекулярной биофизики белка является установление точной геометрии вблизи активного центра в металлоферментах.

Мазалова Виктория Леонидовна
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, 5
Тел.: (863)2975126; Факс (863)2975120; E-mail: mvl-viknik@mail.ru

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ БЕЛКОМ И МЕДЬЮ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А.А.Макарова¹⁾, Д.В.Вялых²⁾, В.Н.Сивков³⁾, А.М.Шикин¹⁾, A.Blüher²⁾, С.Л.Молодцов⁴⁾,
M.Mertig²⁾

¹⁾ Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербурга

²⁾ Технический Университет Дрездена, Дрезден, Германия

³⁾ Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

⁴⁾ European XFEL, Гамбург, Германия

Изучение биологических материалов играет огромную роль в современной науке о материалах, развитии теорий эволюции, а также в биомиметических исследованиях. В частности, биокompозитные структуры являются прототипами новых материалов с необычными свойствами. Уникальный биокompозит, содержащий медь и протеин был обнаружен в эндемических беспозвоночных организмах. Такие организмы, являющиеся биоаккумуляторами меди, могут, как отражать загрязнения окружающей среды тяжелыми металлами, так и служить идентификаторами новых месторождений меди. Рассматривая данный биокompозит как перспективную основу для разработки новых гибридных материалов важно также отметить, что медь обладает ярко выраженными бактерицидными свойствами, а также увеличивает механическую прочность протеина, с которым образует соединение. Однако, биохимический механизм взаимодействия меди и белка и формирования химической связи остается сложной задачей для исследования. Для того чтобы понять природу данного взаимодействия в объектах биологического происхождения, было решено изучить процесс модификации медью модельной системы — поверхностного белкового слоя бактерии *Bacillus sphaericus* NCTC 9602. С помощью методов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и NEXAFS спектроскопии были проведены исследования электронной структуры белков, модифицированных медью. Были проанализированы изменения в электронной структуре образца. По-видимому, медь образует химические связи с атомами азота, находящимися в боковых звеньях белка и модификации пептидной связи не происходит.

Макарова Анна Алексеевна
198504, Санкт-Петербург, ул. Ульяновская, д.1
Тел.: (812)4284369; E-mail: aa-makarova@yandex.ru

МИКРОКОНТЕЙНЕРЫ НА ОСНОВЕ ЧАСТИЦ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЦЕНТРАЛЬНОГО АНЕСТЕТИКА ЛОПЕРАМИДА

И.В. Марченко^{1,2)}, Д.Б. Трушина^{1,3)}, Т.Н. Бородина¹⁾, В.В. Артемов¹⁾, Т.В. Букреева^{1,2)}

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *Физический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, Москва*

Проблема направленной доставки соединений в мозг существенно ограничивает разработку современных подходов к диагностике и лечению церебральных патологий. В настоящее время большой интерес исследователей вызывает интраназальный способ введения препаратов, так как считается, что введенные интраназально вещества способны проникать непосредственно в центральную нервную систему через обонятельную систему, минуя гематоэнцефалический барьер. Для доставки целевых соединений в мозг при их интраназальном введении предложено использовать микроконтейнеры на основе пористых частиц карбоната кальция. В качестве модельного лекарственного вещества был взят центральный анестетик лоперамид, без вспомогательных соединений не проходящий через гематоэнцефалический барьер.

Синтезированы мезопористые микрочастицы карбоната кальция, проведена адсорбция на их поверхность лоперамида. Загрузку контейнеров определяли спектрофотометрически, структуру полученных систем исследовали методом сканирующей электронной микроскопии. Для обеспечения пролонгированного действия контейнеров и повышения их мукоадгезивных свойств поверхность частиц модифицировали биополимерами, в частности, гиалуроновой кислотой. В результате формалинового *in vivo*-теста показана эффективность доставки лоперамида в центральную нервную систему крыс при интраназальном введении таких контейнеров.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы № 22 Президиума РАН и НШ-65636.2010.2.

Марченко Ирина Валерьевна

119333, Москва, Ленинский просп., 59, ИК РАН

Тел.: 8(499)1354020; Факс: 8(499)1351011; E-mail: iramarchenko85@mail.ru

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ 3D СТРУКТУР С НАНО ВКЛЮЧЕНИЯМИ ПОСЛЕ СЛС

Ю.Г. Морозов²⁾, И.В. Шишковский¹⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Самарский филиал

²⁾ Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 142432 Черноголовка, Московской обл.

Послойное селективное лазерное спекание (СЛС) как инструмент для создания функциональных и функционально-градиентных (ФГ) структур и объемных изделий с включениями в виде нано частиц, представляется крайне перспективным направлением. Фактически так можно реализовать парадигму снизу-вверх (down-top) по синтезу интеллектуальных наноизделий (NEMS devices) [1].

В докладе представлены результаты наших экспериментальных исследований и методология послойного синтеза интеллектуальных трехмерных пористых NEMS изделий путем СЛС метал – полимерных порошковых композиций с нановключениями (никель, медь, их оксиды). СЭМ с элементным анализом свидетельствует о стабильности нановключений после жидкофазного лазерного спекания полимера (поликарбонат, полиэтиленкетон). Изучены некоторые электрохимические свойства полученных пористых ФГ изделий и перспективы их использования в качестве фильтрующих мембран с нанокатализаторами, детекторов магнитного поля и т.п.

Работы проводились при поддержке РФФИ (проект 10-08-00208-а).

1. Шишковский И.В. Лазерный синтез функциональных мезоструктур и объемных изделий. М.: Физматлит. 2009. 424 с.

Шишковский Игорь Владимирович, профессор
443011, Самара, ул. Ново-Садовая, д.221
Тел.: (486)3344220; Факс: (486)3355600; E-mail: shiv@fian.smr.ru

СТРУКТУРИРОВАНИЕ ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ $Gd@C_{82}(OH)_x$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В РАСТВОРАХ

И.В. Николаев², Gy. Török¹, В.Т. Лебедев², Ю.С. Грушко², В.П. Седов²,
С.Г. Колесник², В.В. Кукоренко², В.С. Козлов², В.А. Шилин²

¹) *Research Institute for Solid State Physics & Optics, Budapest, Hungary*

²) *Петербургский Институт Ядерной Физики, Гатчина Лен. обл.*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы эндометаллофуллерены $Gd@C_{82}(OH)_x$ ($X \sim 20$) (ЭМФ) в легкой воде – новые контрастирующие вещества для медицинской ЯМР-диагностики. Растворы ЭМФ (20°C, pH ~ 5, концентрация 3 мг/мл) стабилизировали добавлением солей до уровня pH ~ 7, получая два типа растворов $Gd@C_{82}(OH)_x$ - с цитратом и фосфатом Na (концентрации 14 мг/мл и 4.4 мг/мл). Атомы Gd имеют магнитный момент, поэтому молекулы $Gd@C_{82}(OH)_x$ взаимодействуют через дипольные силы, что вместе с водородными связями способствует кластеризации ЭМФ под действием поля. Структурирование растворов с цитратом Na в поле $B = 0.5$ Тесла, ортогональном начальной скорости нейтрона, проявилось в виде пиков интенсивности рассеяния $I(X, Y)$ в плоскости детектора (рис.1а). Однако без поля кластеризации не наблюдали (рис.1б). Напротив, в системе с фосфатом Na при включении поля не возникает ближний молекулярный порядок. Управление структурой молекулярных ансамблей ЭМФ является важным, т.к. состояние $Gd@C_{82}(OH)_x$ (единичные молекулы, кластеры) существенным образом определяет эффективность ЯМР-контраста. а) б)

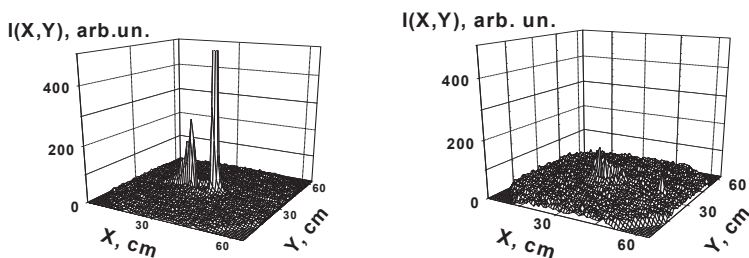


Рис.1. Рассеяние нейтронов в растворе $Gd@C_{82}(OH)_x$ с цитратом Na: $B = 0.5$ Тесла (а), $B = 0$ (б).

Николаев Илья Викторович, аспирант
188300 г. Гатчина Ленинградской обл, Петербургский Институт ядерной физики
Тел.: 8(81371)46396; Факс: 8(81371)39023; E-mail: kriwna2010@mail.ru

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ГЕМОГЛОБИНА ЭРИТРОЦИТАРНОЙ МАССЫ ДОНОРСКОЙ КРОВИ В ПРОЦЕССЕ ЕЕ ХРАНЕНИЯ

А.А. Новакова, С.М. Хвастунов, Т.Ю. Киселева

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Москва

В клинической практике основным препаратом для переливания является эритроцитарная масса (ЭМ), представляющая собой отделенные с помощью центрифугирования от плазмы крови эритроциты, помещенные в специальные контейнеры с гемоконсервантом. В клиниках данные препараты крови хранятся при температуре 4°C, стандарт срока хранения по ГОСТ составляет 35 суток. Однако в процессе длительного хранения в охлажденном виде ЭМ происходит целый ряд физико-химических превращений, которые приводят к деградации молекул гемоглобина, повреждению мембран эритроцитов и их преждевременному разрушению. В результате этого эритроциты теряют функциональную активность, а применение данной ЭМ для трансфузии становится небезопасным гораздо раньше окончания срока хранения.

В настоящей работе приведены сравнительные исследования состояния гемоглобина в стандартной ЭМ, стабилизированной гемоконсервантом ЦФДА-1, и в свежеприготовленной ЭМ (с применением только антикоагулянта) на разных этапах их хранения при температуре 4°C методом мессбауэровской спектроскопии. Исследован процесс деградации гемоглобина от двухвалентных форм (деокси- и оксигемоглобина), через образование трехвалентных форм метгемоглобина, вплоть до образования необратимо деградированных трехвалентных форм — гемихрома, гемина и неспецифически связанных с мембраной свободных ионов трехвалентного железа. Для образцов свежеприготовленной ЭМ была выявлена зависимость кинетики деградации от возрастной группы донора.

Предложена методика оценки состояния гемоглобина в ЭМ, основанная на количественных соотношениях между его двух и трехвалентными формами, количественные характеристики которых выделяются из анализа мессбауэровских спектров.

Новакова Алла Андреевна, профессор
119991, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В.Ломоносова, Дом 1, строение 2
Тел. 8(495)9391226; E-mail: novakova.alla@gmail.com

ЭФФЕКТЫ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЭЛАСТОМЕРАХ

Б.И.Островский

Институт кристаллографии РАН, Москва

В жидкокристаллических (ЖК) эластомерах случайно распределенные молекулярные шивки накладывают топологические ограничения на полимерные цепи, существенно изменяя термодинамику и фазовые переходы в этой системе. При этом составляющие мезогенные молекулы ориентационно и трансляционно упорядочены. Подобные анизотропные сетки перспективны для создания наномоторов и актуаторов, управляемых слабыми электрическими, механическими и оптическими полями.

Нами получены новые данные по фазовым переходам смектик-нематик и нематик-изотропная жидкость в ЖК эластомерах, отличающихся шириной нематической области и различной концентрацией полимерных шивок. Результаты термоупругих исследований и экспериментов по механической деформации эластомеров были сопоставлены с измеренными профилями рентгеновского рассеяния (NSLS, Brookhaven, США). Было обнаружено, что при 5% концентрации шивок характер позиционных корреляций смектических слоев остается таким же, как и в исходной смектической фазе, а фазовый переход в нематическую фазу является термодинамически резким. При увеличении концентрации шивок до 10% слоевой порядок разрушается, заменяясь ближними позиционными корреляциями слоев. При этом как фазовый переход смектик-нематик, так и переход нематик-изотропная жидкость размываются и более не наблюдаются. Температурные зависимости корреляционных длин и термоупругие измерения свидетельствуют о переходе системы в «парасмектическую» область фазового перехода 1-го рода смектик-изотропная жидкость.

Островский Борис Исаакович, д.ф.-м.н.
119333, Москва, Ленинский просп. 59. Институт кристаллографии РАН
Тел.: 8(495)3307847; Факс: 8(499)1351011; E-mail: ostr@cea.ru

СТРУКТУРА ПОРОШКОВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОЛИМЕРНЫМ ПОКРЫТИЕМ НА ОСНОВЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРРОЛОВ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

В.И.Петренко^{1), 2)}, М.В.Авдеев^{1), 3)}, R.Turcu⁴⁾, L.Vekas⁵⁾, В.Л.Аксенов^{3), 1)}, L.Rosta⁶⁾, Л.А.Булавин²⁾

¹⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

³⁾ *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

⁴⁾ *National Institute for Isotopic and Molecular Technologies, Cluj-Napoca, Romania*

⁵⁾ *Center for Fundamental and Advanced Technical Research, Timisoara, Romania*

⁶⁾ *Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) исследованы порошки магнитных наночастиц, покрытых блоксополимерами на основе замещенных пирролов для повышения биосовместимости. В качестве исходных систем использовались водные магнитные жидкости с наночастицами магнетита, стабилизированными посредством двойных слоев поверхностно-активных веществ (комбинации додецилбензолсульфоновой и лауриновой кислот). В качестве замещающих единиц в полимерах использовались карбоксилы, аминокислоты и дипептиды.

Обнаружено, что структура образующегося осадка зависит от вида стабилизирующей оболочки в исходной магнитной жидкости. Для систем с додецилбензолсульфоновой кислотой во внешнем стабилизирующем слое рассеяние в конечных образцах соответствует отдельным полидисперсным частицам с наблюдаемым радиусом инерции в диапазоне 3-5 нм и нерегулярной поверхностью (фрактальная размерность 2.24). Для систем с лауриновой кислотой во внешнем стабилизирующем слое кривые дополнительно модулируются рассеянием на квазикристаллической структуре с характерной длиной корреляции 10 нм. Размер областей упорядоченности не превышает 120 нм. Различия в структурной организации исследованных порошков мы связываем с разной степенью полимерного покрытия магнитных наночастиц, которая, в свою очередь, определяется сорбционными свойствами кислот, используемых в исходной стабилизации.

Петренко Виктор Иванович, к.ф.-м.н.

141980 Дубна, Моск. обл., Жолио-Кюри 6, ЛНФ, ОИЯИ

Тел.: (496-21)64988; Факс: (496-21)65484; E-mail: vip@nf.jinr.ru.

ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ФОРМЫ БИОСИНТЕЗА ХРОМОФОРА В GFP

Н.В. Плетнева, К.А. Горячева, В.И. Мартынов, Н.Г. Гурская, К.А. Лукьянов,
В.З. Плетнев.

*Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и
Ю.А. Овчинникова РАН, Москва*

Методом рентгеноструктурного анализа установлены пространственные структуры зелёного флуоресцентного белка aceGFP (*Aequorea coerulea*; хромофоробразующая триада -Thr-Tyr-Gly-), его бесцветного нефлуоресцентного мутантного варианта aceGFP_G222E и фотоконвертированного зелёного варианта aceGFP_G222E-UV с высоким разрешением 1.5Å, 1.14Å и 1.75Å соответственно. Белок aceGFP с остатком Gly вместо каталитического Glu222 характеризуется яркой зелёной флуоресценцией. При обратной замене Gly222Glu в aceGFP образуется незрелый бесцветный вариант aceGFP_G222E, который подвергается необратимой фотоконверсии в зелёное флуоресцентное состояние aceGFP_G222E-UV.

Хромофор бесцветного aceGFP_G222E представляет собой промежуточное состояние, при котором стадии циклизации и дегидратации уже завершились, а последующая реакция окисления α -C β связи остатка Tyr ещё не произошла. При этом, в наблюдаемой структуре незрелого хромофора имидазолоновый и фенольный циклы некопланарны друг другу.

Облучение незрелого aceGFP_G222E приводит к завершению созревания хромофора в конечное зелёное флуоресцентное состояние. Хромофор aceGFP_G222E-UV представляет собой стандартную планарную бициклическую систему сопряжённых двойных связей, сформированную из пятичленного имидазолонового и фенольного циклов. Сопряжение происходит за счёт образования двойной связи α =C β Tyr хромофора в процессе реакции окисления.

Плетнева Надежда Владимировна, к.х.н.
117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10
Тел.: 8(495)3307510; E-mail: nadand@mail.ru

ЛОКАЛЬНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НАНОЧАСТИЦ SiO_2 ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫХ МЕТИОНИНОМ: XANES И DFT АНАЛИЗ

Ю.С. Подковырина, А.В. Солдатов, М.А. Солдатов, С.А. Сучкова

Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

На основе анализа ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения XANES проведено исследование локальной атомной и электронной структуры метионина, который является незаменимой серосодержащей α -аминокислотой, входящей в состав многих протеинов.

На источниках синхротронного излучения BESSY II (Германия) измерены спектры рентгеновского поглощения наночастиц SiO_2 функционализированных метионином за $L_{2,3}$ краем S.

Теоретический анализ XANES спектров за $L_{2,3}$ краем серы проведен на основе метода конечных разностей (программный комплекс FDMNES 2010), при этом расчет потенциала был выполнен как в рамках muffin-tin приближения, так и вне его. На основе теории функционала плотности (DFT) проведена геометрическая оптимизация структуры метионина.

Хорошее согласие экспериментальных и теоретических спектров XANES было достигнуто в расчетах в полном потенциале (без учета muffin-tin приближения). Таким образом, для адекватного теоретического описания $L_{2,3}$ края S необходимо учитывать не muffin-tin эффекты.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УРИДИНФОСФОРИЛАЗЫ ИЗ *SHEWANELLA ONEIDENSIS*

Т.Н.Сафонова¹⁾, К.М.Поляков^{1,2,3)}, В.П. Вейко⁴⁾, В.О.Попов¹⁾

¹⁾ *Институт биохимии им. А.Н.Баха РАН, Москва*

²⁾ *Институт молекулярной биологии им. В.А.Энгельгардта РАН, Москва*

³⁾ *РНЦ «Курчатовский институт», Москва*

⁴⁾ *Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов*

Фермент уридинфосфорилаза (УФ, КФ 2.4.2.3) катализирует расщепление С–N гликозидной связи в урдине с образованием урацила и рибозо-1'-фосфата. Осуществляя фосфоролитическое расщепление пуриновых и пиримидиновых оснований, УФ обеспечивает клетку предшественниками нуклеотидов. В опухолевых клетках наблюдается повышенный уровень активности этого фермента.

Проведена работа по клонированию гена УФ из *Shewanella oneidensis*, сконструирован штамм-продуцент. Фермент получен с чистотой 98%. Показано, что удельная активность УФ из *Shewanella oneidensis* MR-1 (130 ед./мг) существенно выше удельной активности УФ из *E.coli* (60 ед./мг).

Получены кристаллы УФ из *Shewanella oneidensis* (М.в. 54. кДа) в свободном состоянии. Для кристаллизации использовался лиофильно высушенный препарат. Проведен поиск условий кристаллизации с использованием наборов для кристаллизации (скрининга) глобулярных белков (Hampton Research). Дальнейшая оптимизация условий кристаллизации позволила получить кристаллы, пригодные для сбора рентгеноструктурных данных. Кристаллизация проводилась методом висячей капли посредством диффузии в парах.

Набор дифракционных данных был собран в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий при 100 К с кристалла размером 0.4 x 0.35 x 0.25 мм (пр. гр. P2₁, Z = 4, a = 91.54 Å, b = 95.93 Å, c = 91.61 Å, β = 119.99°) до разрешения 1.8 Å. Первичная обработка набора дифракционных данных проведена с использованием программы XDS. Структура УФ из *Shewanella oneidensis* решена методом молекулярного замещения и уточнена с использованием программ Molrep и Refmac5.

Сафонова Татьяна Николаевна, к.х.н.

119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33, строение 2, Институт биохимии им А.Н.Баха РАН

Тел.: 8(495)9523681; Факс: 8(495)9542732; E-mail: tn_safonova@inbi.ras.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИСАХАРИДОВ ПРИРОДНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ МЕТОДАМИ МАЛОУГЛОВОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А.Симаков¹⁾, А.Д.Ланцов, С.С.Вознесенский, А.Н.Галкина, А.А.Сергеев

¹⁾ *Институт автоматизи и процессов управления ДВО РАН, Владивосток*

Проведено исследование внутренней структуры гибридных биополимерсиликатных нанокомпозитов, полученных матричным способом с использованием в качестве основы полисахаридов природного происхождения: альгината натрия и гиалуроната натрия, с применением методов малоугловой дифракции рентгеновского излучения. Показано, что применение методов малоугловой дифракции рентгеновского излучения позволяет получать данные об изменении внутренней структуры образцов на всех фазах их формирования, включающих в себя гидролиз на поверхности полисахарида Si-прекурсора tetrakis(2-hydroxyethyl) orthosilicate (THEOS), конденсацию мономеров прекурсора в олигомеры и направленное сшивание олигомеров Si-прекурсора полисахаридом природного происхождения. Получено хорошее соответствие экспериментальных данных о размерах неоднородностей внутренней структуры нанокомпозитов с результатами математического моделирования. Полученные данные дают возможность оптимизировать процессы матричного синтеза биополимерсиликатных нанокомпозитов и производных на их основе.

Симаков Евгений Анатольевич
690041, Владивосток, ул. Радио, д.5
Тел.: (950)2936344; E-mail: evgeniy.simakov@mail.ru

МУЛЬТИПЛЕТНЫЕ И ДЕНДРИМЕРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

Л.Ю. Складаров

ФГБУ «Институт Иммунологии» Москва, Россия

Первыми мультиплетами были иммуноактивные пептиды, имевшие разветвленное, дендримерное строение^{1,2}. Термин мультиплетные относится к ряду соединений содержащих повторяющиеся одинаковые или разные функциональные участки*. За короткое время получение и изучение мультиплетов (в том числе и супрамолекулярных) стало самостоятельной задачей, поскольку позволяет сравнительно просто получать высокомолекулярные соединения (в том числе дендримеры и наночастицы) с узким распределением масс (вплоть до мономеров) с необычными свойствами. Для синтеза аналогов порфиринов и их дендримеров использованы 3-амино-,3-окси-4,5-дицианпиридины и 6-пептидилпиридины полученные конденсацией диенофилов и производных аминокислот, пептидов*. Особенностью ядер данных пиридинов в порфиринах является наличие реакционноспособных боковых групп. Реакция дендримеризации приводила к кратному возрастанию молекулярной массы за счет присоединения двух молекул исходного пиридина (2-метил-3-амно-,3-окси-4,5-дицианпиридина) к монопорфиру и последующей кватернизации. Начальный этап этого процесса отслеживается масс-спектрометрически – 158-159 (исх. пир.), 634-637 (порф.), 785-798 (+1 пир.), 950-1016 (+2 пир.), 3920-4030 (1 дендр.), 4910-4930 (1 денд.+порф+2пир) и т.д. Боковые функциональные группы служат источником связей для образования из них дендримеров и супрамолекулярных структур не только за счет водородных, ионных, ковалентных но и металлохелатных и иминохингидронных связей, в том числе с белками и ДНК. Структурирование за счет гидрофобных связей наблюдалось у мультиплетных пептидов** содержащих остатки жирных кислот и алкилированных производных порфирина (ковалентные липосомы).

1.Складаров Л.Ю., Копина Н.А., Золина Н.Н. // Иммуностимулирующая активность олигомерных пептидов – мультиплетных детерминант // V Всесоюзный Биохимический Съезд, Наука, 1986, том 3, с 29-30

2. Tam, J., // Synthesis and properties multiple antigen peptide system. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 85 (1988). 5409-5413.

Складаров Леонид Юрьевич, ведущий научный сотрудник
117315, Москва, ул.Миклухо-Маклая, д.65. кор.4 к. 41
Тел.: 8(499)3337273Факс: 8(499)6171027 E-mail; lsklyarov@yandex.ru

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ЖИДКО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИСПЕРСИЙ ДНК С ИНКОРПОРИРОВАННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

С.Г.Скуридин¹⁾, Ю.М.Евдокимов¹⁾, В.В.Волков²⁾, К.А.Дембо²⁾, Э.В.Штыкова²⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва

²⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

Структура холестерических жидко-кристаллических дисперсий (ХЖКД), сформированных из двухцепочечных молекул ДНК с инкорпорированными наночастицами золота была исследована методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР). Полученные экспериментальные данные стали основой для структурного моделирования с помощью новейших методов обработки и интерпретации данных МУР [1-3]. Было показано, что наночастицы золота внедряются между молекулами ДНК и формируют кластеры, которые состоят из наночастиц металла с размерами 1.0 – 1.5 нм и образуют короткие и длинные цепочки, обвивающие макромолекулы ДНК. Процесс внедрения наночастиц золота сопровождается изменением упорядоченного расположения соседних молекул ДНК в слое и приводит к нарушению пространственной структуры частиц дисперсии, что может быть одной из причин генотоксического эффекта этих наночастиц.

1. Konarev, P. V.; Volkov, V. V.; Sokolova, A. V.; Koch, M. H. J.; Svergun, D. I. // *J. Appl. Crystallogr.*, (2003); 36, 1277-1282.

2. Svergun D.I. // *J. Appl. Cryst.* 1992. V.25. P.495.

3. Svergun, D.I. // *Biophys. J.* 1999. V.76 (6), P.2879

Сергей Геннадьевич Скуридин, в.н.с.
119991 г. Москва, ул. Вавилова, д. 32
Тел.: 8(499)1359720; Факс: 8(499)1351405; E-mail: lancet-bio@bk.ru

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ FE-ЗАВИСИМОЙ СУПЕРОКСИДДИСМУТАЗЫ ИЗ АНАЭРОБНОЙ ТЕРМОАЦИДОФИЛЬНОЙ АРХЕИ *ACIDILOBUS SACCHAROVORANS*

Э.С. Слущкая¹⁾, Е.Ю. Безсуднова¹⁾, К.М. Поляков¹⁾, Н.В. Равин²⁾, Т.Н. Сафонова¹⁾,
Т.Н. Стеханова¹⁾, В.О. Попов¹⁾.

¹⁾ *Институт Биохимии им. А.Н. Баха РАН, Москва*

²⁾ *Центр «Биоинженерия» РАН, Москва*

Термостабильная рекомбинантная супероксиддисмутаза из термоацидофильной археи *Acidilobus saccharovorans* (As_COД) была экспрессирована и выделена из *E. coli*. Введение железа в активный центр As_COД привело к 20-кратному увеличению активности (до 5000 ед/мг белка). Исследования методом ДСК показали, что кривая необратимой термоденатурации As_COД содержит три пика с температурами перехода 98.2°C, 107.3°C и 114.5°C, соответственно. Набор дифракционных данных кристаллов As_COД был собран в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий при 100 К с кристалла размером 0.4 x 0.4 x 0.2 мм до разрешения 1.76 Å. Пространственная группа $P6_422$, $a = b = 99.4$ Å, $c = 81.4$ Å. Полнота набора 99.2%. Первичная обработка набора дифракционных данных проведена с использованием программы XDS. Структура решена методом молекулярного замещения и уточнена с использованием программ Molrep и Refmac5. Встраивание модели в электронную плотность проведено с использованием программы COOT. В независимой части ячейки находится один мономер. Структура уточнена до $R_f = 20.5\%$, $R_{free} = 25.2\%$. Отличительной чертой As_COД является замена высоко консервативного остатка триптофана, образующего гидрофобную внешнюю сторону полости активного центра, на фенилаланин. Проведено структурное сравнение As_COД с ферментами из других источников.

Работа поддержана ФЦП «Научные и научно - педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 годы (ГК № 02.740.11.0765 от 12 апреля 2010 г.).

Слущкая Эльвира Семеновна
119071, Москва, Ленинский пр. 33/2;
Тел.: 8(926)0699166; Факс: 8(495)9542732; E-mail: elslutskaya@yandex.ru

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА 5-ФТОРУРАЦИЛА С УРИДИНФОСФОРИЛАЗАМИ ИЗ БАКТЕРИЙ И ЧЕЛОВЕКА

С.Е.Сотниченко, А.Г.Габдулхаков, Н.Е.Жухлистова, А.А.Лашков

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Уридинфосфорилаза (**UPh**) - фермент необходимый клеткам для их жизнедеятельности. В организме человека **UPh** принимает участие в метаболизме противоопухолевых препаратов - антиметаболитов пиримидинов. К последним относится 5-фтороурацил (**5-FUra**), использующийся при лечении опухолевых заболеваний (напр., рака прямой кишки и кожи). Кроме того, лиганды **UPh** также могут использоваться в качестве противопаразитарных препаратов.

Пространственная структура комплекса **UPh из Salmonella typhimurium (StUPh)** с **5-FUra** определена методом рентгеноструктурного анализа с разрешением 2.2 \AA ($R_f=20.1\%$ $R_{free}=25.8\%$, $DPI=0.233\text{\AA}$) и принята в Protein Data Bank (**ID PDB: 3NSR**). Установлено, что при связывании **5-FUra** с **Arg223** активного центра происходит изменения конформации функционально значимой петли **L9**. Выяснено, что на ряду с основным местом связывания **5-FUra** в урацилсвязывающем центре **UPh** существует дополнительное место его связывания в области петли **L9**, которое также влияет на конформацию последней.

Методом компьютерного моделирования решены структуры нативной **UPh из Y.pseudotuberculosis (YpUPh)** и её комплекса с **5-FUra**. Проведен молекулярный докинг **5-FUra** в **UPh человека (hUPP1)** (**ID PDB: 3NBQ**). Данные докинга указывают на существование в **YpUPh** и **hUPP1** дополнительного места связывания в области петель эквивалентных петле **L9** в **StUPh**. Существование дополнительного места связывания следует учитывать как при рациональном конструировании новых лекарственных препаратов, так и при оптимизации протокола лечения.

Работа выполнена за счет средств базового бюджетного финансирования РАН. Авторы благодарят в.н.с. к.ф.-м.н. Михайлова А.М. за предоставленную тему исследования и научное руководство.

Сотниченко Сергей Евгеньевич
119333, Москва, ул. Ленинский просп., д.59
Тел.: 8(916)3847816 E-mail: sombrios@mail.ru

**ЛОКАЛЬНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА МУЛЬТИВАЛЕНТНО СВЯЗАННЫХ
АМИНОЛИГАНДОВ С НАНОЧАСТИЦАМИ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ:
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ СИ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ**

С.А.Сучкова¹⁾, К. Граф²⁾, Э. Рюль³⁾, А.В. Солдатов⁴⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, 344090 Ростов-на-Дону

²⁾ Freie Universität Berlin, Germany, 14195 Berlin, Takustr. 3, Physikalische und Theoretische Chemie

³⁾ Freie Universität Berlin, Germany, 14195 Berlin, Takustr. 3, Physikalische und Theoretische Chemie

⁴⁾ Южный федеральный университет, 344090 Ростов-на-Дону

Наночастицы функционализированные аминокислотами привлекают значительный интерес в области нао-био-технологий в связи с их уникальными свойствами и потенциальным применением в оптических, магнитных и электронных устройствах. Мультивалентность определяется как химическое взаимодействие лигандов с несколькими идентичными функциональными группами, которые присоединяются к многократно представленным акцепторным позициям. Химическая связь в мультивалентных взаимодействиях значительно сильнее, чем в одновалентных. Недавно были разработаны синтез мультивалентных лигандов и подготовка малых амино-стабилизированных серебряных и платиновых частиц. Наночастицы функционализированные аминокислотами были изучены с использованием спектроскопии синхротронного излучения (*Helmholtz-Zentrum Berlin, BESSY II*) и высокоточного теоретического многомасштабного моделирования, выполненного на суперкомпьютерных кластерах. Метод XANES спектроскопии был использован для получения информации о локальной электронной структуре исследуемых объектов. В дополнение, метод DFT (теории функционала электронной плотности) был использован для уточнения полученной методом XANES информации.

Сучкова Светлана Алексеевна
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5
Тел.: (863)2975326; E-mail: suchkova_sv@inbox.ru

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ВОДНЫХ ДИСПЕРСИЙ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

А.В.Томчук^{1),2)}, М.В.Авдеев^{1),3)}, В.Л.Аксенов^{3),1)}, Л.А.Булавин²⁾, С.Н.Ивашевская⁴⁾,
Н.Н.Рожкова⁴⁾, N.Schreiber⁵⁾, J.Schreiber⁶⁾

- 1) *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*
- 2) *Киевский национальный университет им.Т.Шевченко, Киев, Украина*
- 3) *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*
- 4) *Институт геологии КарНЦ, Петрозаводск, Россия*
- 5) *TU Dresden, Institute for Physikalische Chemie, Dresden, Germany*
- 6) *Fraunhofer-Institute for Zerstorun Profverfahren, Dresden, Germany*

Детонационные наноалмазы (ДНА) образуются в результате взрыва кислородно-несбалансированных взрывчатых веществ без наличия дополнительных источников углерода и представляют собой агломераты нанокристаллитов (размер 5-10 нм). Большой интерес проявляется к водным дисперсиям разделенных наноалмазов, связанный с широкими возможностями модификации поверхности наночастиц для различных применений.

В данной работе метод малоуглового рассеяния нейтронов был использован при изучении структуры водных дисперсий ДНА на уровне 1-100 нм для систем, полученных в различных условиях. В частности, свежеприготовленные дисперсии сравнивались с надосадочными образцами «старых» систем с такими же начальными концентрациями (0.1–1 wt%). Аналогично предыдущим исследованиям [1] в растворах обнаруживается сильная агрегация с размером кластеров от 60 нм. При этом для различных систем можно выделить общее свойство: фрактальная размерность кластеров близка к 2.4, что указывает на общий механизм кластеризации в таких системах. С помощью вариации контраста подтверждено существование неалмазной компоненты в составе коллоидных частиц дисперсий, что коррелирует с присутствием на поверхности кристаллитов графеновой оболочки.

1. M.V.Avdeev, N.N.Rozhkova, V.L.Aksenov, V.M.Garamus, R.Willumeit, E.Osawa, J. Phys. Chem. C 113 (2009) 9473–9479

Томчук Александр Васильевич
141980, Дубна, ул.Жолио-Кюри, д.6
Тел.: (49621)62674; Факс: (49621)65484; E-mail: tomchuk@jinr.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СМЕШАННЫХ РАСТВОРОВ C₆₀/НМП/ТОЛУОЛ МЕТОДАМИ УФ-ВИД СПЕКТРОСКОПИИ И МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Т.В. Тропин¹⁾, Т.А. Кирей^{1),2)}, А.А. Кизима^{1),2)}, М.В. Авдеев¹⁾,
В.Л. Аксенов^{1),3)}, Л.А. Булавин²⁾

- 1) Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна
- 2) Киевский национальный университет им. Т. Шевченко, Киев, Украина
- 3) Российский научный центр «Курчатовский Институт», Москва

Исследование агрегации фуллерена C₆₀ в полярных растворах является важной задачей для поиска методов приготовления молекулярных водных растворов C₆₀, необходимых для применений в биомедицине. В связи с данной задачей активно исследуется [1] рост кластеров в C₆₀/N-метилпирролидоне (НМП) методами УФ-Вид спектроскопии, малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), экстракции и масс-спектроскопии. Обнаружено, что при добавлении воды (сильнополярный растворитель) к раствору C₆₀/НМП наблюдается изменение УФ-Вид спектра (сольватохромный эффект), которое также сопровождается реорганизацией кластерного состояния раствора.

В настоящей работе аналогичным образом исследуется сольватохромизм и сопутствующие эффекты при введении в систему C₆₀/НМП слабополярного толуола, который смешивается с НМП в любых пропорциях. В отличие от воды, в данном случае фуллерен растворим в добавляемом растворителе. Обнаружено, что сольватохромный эффект как функция содержания толуола зависит от метода приготовления системы (толуол добавляется к C₆₀/НМП, либо, наоборот, НМП добавляется к C₆₀/толуол). Исследование методом МУРН показывает, что реорганизация кластерного состояния в C₆₀/НМП/толуоле аналогична системе C₆₀/НМП/вода. Объемная доля добавляемого толуола, необходимая для реорганизации, выше, чем в водных системах. Обсуждается связь этой зависимости с сольватохромным эффектом. Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ №МК-1055.2011.2

1. М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов, Т.В. Тропин, ЖФХ, т. 84 №8, с. 1405-1416 (2010).

Тропин Тимур Васильевич, к.ф.-м.н.
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, ОИЯИ, ЛНФ
Тел.: (49621)62674; Факс.: (49621)65916; E-mail: ttv@nf.jinr.ru

О СТРУКТУРЕ НАНОАЛМАЗОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИИ

Ш.Туйчиев¹⁾, Б.М.Гинзбург²⁾, Е.Осава³⁾, С.Табаров¹⁾, Д.Рашидов¹⁾

¹⁾ *Таджикский национальный университет, Душанбе, Таджикистан*

²⁾ *Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³⁾ *Nanocarbon Research Institute, Ueda, Nagano, Japan*

Методами рентгенографии на больших (БР) и малых углах (МР) рассеяния исследована структура водных взвесей наноалмазов (НА) фирмы Amando, их мелкозернистых порошков и микродисперсной пудры. На БР всех исследованных образцов, наряду с широким аморфным гало с максимумом в области углов дифракции $2\theta=18^\circ$, что соответствует среднему расстоянию $4,93\text{\AA}$, на углах $44,2^\circ$ и $75,4^\circ$ наблюдаются соответственно характеристические рефлексии 111 и 220 от кристаллических агрегатов НА, размеры которых составляют $4,5\pm 0,5\text{ нм}$.

На МР этих же образцов в интервале углов рассеяния 12-140 минут наблюдается сильное диффузное рассеяние, интенсивность которого монотонно уменьшается с ростом угла рассеяния. Представление МР в координатах Гинье, позволило установить, что во всех взвесьях, в порошке и пудре имеются рассеивающие частицы с размерами 1,6 и 4,5 нм.

Наибольший из размеров – 4,5 нм хорошо согласуется с размерами, полученными из БР, а наименьшее 1,6 нм соизмерим с размером элементарного блока. Из сравнения полученных данных следует, что, по-видимому, частицы НА состоят как из одиночных, так и из совокупности элементарных блоков. Внедрение НА наноскопических размеров в полимеры и другие материалы могут придать соответствующим композитам свойства нанокомпозитов и позволяют в широких пределах варьировать их технические свойства. Исследованиями установлено, что внедрение НА в полиэтилен низкой плотности, полученного из раствора и расплава сопровождается повышением прочности, уменьшением деформируемости и улучшением светостойкости полимера. Проявление этих свойств зависит от концентрации НА в матрице.

Туйчиев Шарофиддин, профессор
734025, Душанбе, ул.Рудаки, д.17
Тел.: (99237)217931; E-mail: tuichiev@mail.ru

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В СИСТЕМЕ ОБРАТНЫХ МИЦЕЛЛ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ

Д.Л.Тытик¹⁾, А.А.Ревина^{1,2)}, О.В.Суворова²⁾, В.И.Кузьмин³⁾, А.Ф.Гадзаов³⁾,

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

²⁾*ООО «Лаборатория нанокompозитных материалов», г. Москва*

³⁾*Московский государственный институт радиотехники, электроники и
автоматики, г. Москва*

Проведены эксперименты по методу Д.Н.Насонова [1], в ходе которых исследовалось воздействие акустического сигнала (уровень ~140 дБ) разной частоты на обратномиецеллярную систему (ОМС) $\text{AgNO}_3/\text{H}_2\text{O}/\text{AOT}/\text{изооктан}/\text{Qr}$, содержащую наночастицы серебра, синтезированные по методу [2]. Определены критические частоты акустических сигналов, воздействие которых на ОМС приводило к смещению полос в спектрах оптического поглощения ОМС после обработки по сравнению с контрольным образцом.

На основании теории критических уровней развития природных систем [3] найдена шкала, связывающая частоты внешнего акустического сигнала с длинами волн спектров оптического поглощения, на которых возможен отклик коллоидных систем различной природы.

Работа поддержана РФФИ грант № 11-03-00740-а.

1. Насонов Д.Н. Местная реакция протоплазмы и распространяющееся возбуждение. Изд. АН СССР, М.-Л., 1962.
2. Ревина А.А. Адсорбция и окислительные процессы в современных нанотехнологиях. Физикохимия поверхности и защита материалов. 2009. Т 45, № 1, С. 58.
3. Жирмунский А.В., Кузьмин В.И. Критические уровни в развитии природных систем. Л.: Наука, 1990.

Тытик Дмитрий Леонидович, с.н.с
119991, г. Москва, Ленинский проспект 31
Тел.: 8(495)9554421; Факс: 8(495)9525308; E-mail: dtytik@rambler.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ (Cu, Zn, Pb): АНАЛИЗ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

М.Б. Файн, Ю.С. Подковырина, А.В. Солдатов

Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

Проведено изучение локальной атомной и электронной структуры комплексов тяжелых металлов (Cu, Zn, Pb) в почве.

Полученные экспериментальные XANES спектры К-края меди, К-края цинка и L-края свинца в образцах почвы, обогащенной данными металлами, позволили определить характер их взаимодействия с почвой. Основной характеристикой токсичности тяжелых металлов является их доступность, т.е. водорастворимость. Анализ экспериментальных спектров показал, что оксид меди (CuO) является малоподвижной фазой меди, в то время как нитрат меди $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ является водорастворимой фазой. Было установлено, что взаимодействие металла с почвой происходит по одинаковому механизму при концентрации внесенного металла от 2000-10000 мкг/кг. Также получены экспериментальные спектры фазовых компонент почвы.

Теоретические спектры К-края меди, К-края цинка и L-края свинца рассчитаны методом полного многократного рассеяния и методом конечных разностей, при этом расчет потенциала был выполнен с учетом и без muffin-tin приближения. Согласие экспериментальных и теоретических спектров было достигнуто в расчетах, проведенных в полном потенциале (без учета muffin-tin эффектов).

Файн Марина Борисовна
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге 5
Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2901003; E-mail: eyfain@rambler.ru

МОЛЕКУЛЯРНАЯ И НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ИНУЛИНАЗ И ЛИПАЗ РАЗЛИЧНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

М.Г. Холявка, А.С.Беленова, Т.А. Ковалева, В.Г. Артюхов

Воронежский государственный университет, Воронеж

Для понимания механизма действия ферментов *in vivo* необходимо исследовать их структурно-функциональные свойства, особенности молекулярной и надмолекулярной организации. Вопрос о существовании надмолекулярной организации у инулиназ и липаз различного происхождения до сих пор окончательно не решен. Неизвестно, почему у одних организмов фермент функционирует в качестве мономера, а у других как димер или тетрамер.

Для изучения надмолекулярной организации инулиназ и липаз и доказательства предположения о существовании их в форме димеров нами был использован комплексный подход, заключающийся в сочетании атомно-силовой микроскопии с методами инфракрасной спектроскопии, гель-хроматографии, электрофореза и динамического светорассеивания.

Установлено, что инулиназа из *Kluyveromyces marxianus* Y-303 является гетеродимером с молекулярной массой 63 ± 2 кДа и радиусом $6,12 \pm 0,18$ нм. При разделении димерной молекулы на мономеры происходит увеличение количества нерегулярных участков на 6 % для субъединицы № 1 ($54,8$ кДа; $5,19 \pm 0,30$ нм) и на 10 % для субъединицы № 2 ($8,4$ кДа; $1,01 \pm 0,01$ нм).

Липаза из *Rhizopus niveus* также характеризуется наличием надмолекулярной организации в виде гомодимера с молекулярной массой 98 ± 2 кДа и радиусом $10,24 \pm 0,41$ нм. Выявлено, что при разделении димерной молекулы липазы на мономеры (48 ± 2 кДа; $4,9 \pm 0,30$ нм) происходит уменьшение количества α -спиралей на 3 %, снижение количества β -структур на 8 % и увеличение количества неупорядоченных участков на 11 %.

Холявка Марина Геннадьевна, к.б.н., ведущий биолог
394006, Воронеж, Университетская пл., д. 1, каб. 66
Тел.: (473)2208586; Факс: (473)2208755; E-mail: holyavka@rambler.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТЕПЕНИ МОДИФИКАЦИИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА КОНЬЮГАТОВ АЛЬБУМИНА

И.Н. Шабанова^{1,2)}, А.К.Барсуков¹⁾, О.В.Кожевникова¹⁾, Е.А.Наймушина¹⁾

¹⁾Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

²⁾Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск

Одной из актуальных проблем в настоящее время является повышение устойчивости целевых белков биопрепаратов плазмы к термической обработке на стадии производства.

Проведено изучение влияния температуры и степени модификации на форму рентгеноэлектронных спектров белка (альбумина). Исследовались немодифицированная форма белка и модифицированная совиалем с различным его содержанием. Исследования проводились на уникальном рентгеноэлектронном магнитном спектрометре. Преимущество электронного магнитного спектрометра по сравнению с электростатическими спектрометрами заключается в конструктивном отделении энергоанализатора магнитного типа от вакуумной камеры спектрометра, что позволяет применять различные способы воздействия на образец (сопровождающиеся интенсивным выделением агрессивных газовых потоков) в вакуумном объеме спектрометра без ущерба для фокусирующих свойств прибора. Изучались C1s, N1s, O1s спектры внутренних уровней образцов нативной и модифицированных форм альбумина (1:1, 1:3, 1:5) при комнатной температуре, а также полученные при нагревании. Определены параметры спектров, характеризующие окислительное повреждение белка.

Немодифицированный альбумин изменяет структуру, определяемую по спектрам C1s и N1s при нагреве выше 70-80°C. В его составе исчезают атомы азота, связанные с атомами водородом (NH₃, NH₂) и карбоксильные группы COOH, наблюдается рост карбонильных групп C=O и -C-C- связей. При модифицировании альбумина совиалем (конъюгат) отмечается существенное повышение термостабильности для определенного содержания совиала (5:1) до T=473K. Это связано с образованием ковалентной связи атомов азота с атомами углерода (-C-NH₂-), что упрочняет группы NH₂. В случае уменьшения содержания совиала (3:1 и 1:1) повышения температурной устойчивости не наблюдается, происходит окислительное повреждение белка.

Шабанова Ирина Николаевна, д.ф.-м.н.
426000, Ижевск, ул. Кирова, д. 132
Тел.: 8(3412)432539; Факс: 8(3412)722529; E-mail: xps@fti.udm.ru

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЖЕСТКОЦЕПНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ ДЕНДРИМЕРОВ, СОДЕРЖАЩИХ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ CdS, МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

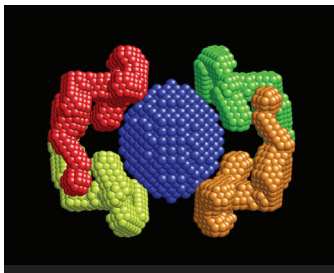
З.Б. Шифрина¹⁾, Э.В.Штыкова²⁾, Л.М.Бронштейн¹⁾, Д.И.Свергун³⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

²⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

³⁾ Европейская Лаборатория Молекулярной Биологии, Гамбург, Германия

Полупроводниковые наночастицы CdS (квантовые точки) активно используются как в медицинской диагностике и терапии, так и в различных электронных устройствах, включая солнечные батареи. В настоящей работе исследовались процессы формирования квантовых точек CdS в присутствии жестких полипиридилфениленовых дендримеров третьей генерации (PPPD) в зависимости от условий синтеза и архитектуры PPPD. Методом малоуглового рентгеновского рассеяния впервые было показано, что сильное взаимодействие между молекулами дендримера и растущими квантовыми точками приводит к образованию несферических, эллипсоидальных наночастиц CdS, окруженных и стабилизированных в среднем 4-мя макромолекулами дендримеров. Уникальная морфология CdS /PPPD нанокомпозитов и их высокая эмиссионная способность позволяет использовать их для дальнейших разработок в области полупроводниковых нанотехнологий.



Зинаида Борисовна Шифрина, руководитель группы
119991 Москва, ул. Вавилова, д. 28
Тел.: 8(499)1359713; Факс: 8(499)1355055; E-mail: shifrina@ineos.ac.ru

IN-VIVO ТЕСТИРОВАНИЕ НА КУЛЬТУРЕ МЕЗЕНХИМАЛЬНО-СТРОМАЛЬНЫХ КЛЕТОК ПОРИСТЫХ МАТРИКСОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ СЛС

И.В. Шишковский¹⁾, С.Е. Волчков²⁾; О.В. Тюмина²⁾

¹⁾ *Учреждение Российской академии наук Физический институт
им. П.Н. Лебедева РАН, Самарский филиал*

²⁾ *Государственного учреждения здравоохранения Самарской области
«Клинический центр клеточных технологий»*

Мультипотентные мезенхимально-стромальные клетки (ММСК) являются отличной моделью для тестирования на токсичность и биосовместимость различных средств медицинского назначения, в том числе искусственных трехмерных (3D) тканево-инженерных конструкций, клеточных каркасов и биоимплантатов. Такие исследования позволяют предсказать поведение имплантируемого материала в организме человека. В нашей работе мы проводили тестирование опытных образцов трехмерных пористых матриксов, полученных методом послойного селективного лазерного спекания (СЛС) из нитинола и нитинола с гидроксиапатитом (ГАП) для оценки их токсичности и биосовместимости.

Отмечено, что наличие имплантационного материала в культуре ММСК «побуждает» клетки к интенсивному старению и замедляет пролиферацию в сравнении с контролем. Показано снижение двигательной активности (хемотаксис) ММСК в присутствии имплантационного материала. Причем избыток ГАП и развитая суб (нано-) структура пористого 3D матриксов с размерами (на порядок и более!) меньше характерных размеров ММСК существенно ухудшают этот показатель.

Работы проводились при поддержке Программы Президиума РАН «Фундаментальные науки - медицине».

Шишковский Игорь Владимирович, профессор
443011, Самара, ул. Ново-Садовая, д.221
Тел.: (486)3344220; Факс: (486)3355600; E-mail: shiv@fian.smr.ru

МАТРИКСНЫЙ БЕЛОК ВИРУСА ГРИППА М1: МАЛОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЯЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Э.В. Штыкова¹⁾, Л.А.Баратова²⁾, В.В.Волков¹⁾, К.А.Дембо¹⁾, Д.И.Свергун³⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

²⁾ Институт физико-химической биологии им.А.Н.Белозерского, Московский государственный университет, Москва

³⁾ Европейская Лаборатория Молекулярной Биологии, Гамбург, Германия

Объектом структурных исследований методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР) являлся мажорный белок М1 вируса гриппа А. Благодаря множественным взаимодействиям М1 формирует белковый матрикс вириона, который локализуется под липидной мембраной. Помимо структурной роли в вирионе, на поздних стадиях инфицирования клетки белок М1 выполняет ряд других важных физиологических функций, что делает структурные исследования этого белка весьма актуальными. Однако детальная пространственная структура интактного М1 протеина не была изучена, несмотря на многократные попытки его кристаллизации, в результате чего вклад функционально важного С-концевого домена в структурные и функциональные характеристики полноразмерного белка М1 до сих пор оставался неясным. Нами впервые была реконструирована структура интактного М1 белка в растворе с использованием новейших методов обработки и интерпретации данных МУР. Детальный анализ и моделирование с помощью метода молекулярной тектоники выявили структурно поляризованную молекулу с компактным NM-доменом и слабо структурированным С-терминалом. Выявленные структурные характеристики полноразмерного вирусного матриксного белка М1 объясняют специфическую способность этого белка модерировать многоступенчатый процесс вирусной инфекции, благодаря гибкости и высокой доступности его С-концевой области.

Элеонора Владимировна Штыкова, с.н.с.
119333 г. Москва, Ленинский пр. 59
Тел.: 8(499)1354020; Факс: 8(499)1351011; E-mail: shtykova@ns.crys.ras.ru

СТРУКТУРНЫЕ ИСЛЕДОВАНИЯ АГРЕГАТОВ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА БИОСОВМЕСТИМОЙ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ ПО ДАННЫМ РАССЕЯНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

А.В. Шуленина^{1),2)}, М.В. Авдеев^{1),3)}, Я.В. Зубавичус¹⁾, В.Л. Аксенов^{1),3)}

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

²⁾ *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва*

³⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

В настоящее время повышенный интерес проявляется к изучению структуры магнитных жидкостей (МЖ), имеющих широкие перспективы применения в медицине (магнитная гипертермия, контрастные среды в магнитно-резонансной томографии, контролируемая внешним магнитным полем адресная доставка лекарств и др.). Существенной проблемой в развитии такого рода применений является агрегационная неустойчивость МЖ в сильнополярных растворителях, в частности, воде. В связи с этим важной задачей является детектирование и анализ агрегации в водных МЖ.

В работе представлены результаты использования атомно-силовой микроскопии магнитных жидкостей на основе коллоидных растворов наночастиц магнетита, стабилизированных полиакриловой кислотой в воде, с целью определения функции распределения агрегатов наночастиц по размерам. Для иммобилизации агрегатов на подложке в слое воды использовалось внешнее магнитное поле. Полученные данные сравниваются с результатами измерений этой же функции распределения методом малоуглового рентгеновского рассеяния, а также методом атомно-силовой микроскопии на высушенных осадках рассматриваемой системы, образующихся при испарении жидкой среды в различных условиях. Также на основе анализа данных рентгеновской дифракции определен средний размер наночастиц магнетита и уточнена его структура.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Курчатовский институт» в рамках госконтракта 16.552.11.7003.

Шуленина Александра Владимировна
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1
Тел.: 8(499)1967263; Факс: (499)1967723; E-mail: avp@srd.sinp.msu.ru

ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СЕНСОРНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОННЫХ НАНОСТРУКТУР

К.В. Шульга¹⁾, Д.А. Мамичев¹⁾, И.А. Черных¹⁾, В.В. Роддатис¹⁾, А.А. Коновко²⁾,
Ю.В. Грищенко¹⁾, М.Л. Занавескин¹⁾, А.Н. Марченков¹⁾, М.В. Ковальчук¹⁾

¹⁾Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,
НБИК-центр

²⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Физический факультет

На сегодняшний день весьма актуальной является задача создания сенсоров для высокочувствительного и селективного биохимического экспресс-анализа. Достаточно несложным в реализации и обладающим высокой чувствительностью является метод анализа, основанный на эффекте поверхностного плазмонного резонанса (ППР).

Одним из наиболее перспективных материалов для создания сенсорных ППР-элементов являются металлические нанорешетки, которые выгодно отличаются по своим плазмонным характеристикам от тонких металлических пленок. В данной работе были получены и исследованы упорядоченные металлические наноструктуры на основе тонкопленочных покрытий золота, нанесенных на диэлектрическую подложку. Показано, что в данных наноструктурах наблюдается эффективное возбуждение поверхностных плазмон-поляритонных волн в видимом диапазоне спектра. Оптимизация структурных параметров данных наноструктур позволяет реализовать режим эффективного возбуждения поверхностных плазмонов на требуемых частотах и получать необходимое распределение электрического поля вблизи их поверхности для достижения максимальной чувствительности к детектируемым молекулам. Дальнейшая биофункционализация упорядоченных металлических наноструктур посредством иммобилизации на их поверхности биомолекул позволит наряду с очень высокой чувствительностью обеспечить высокую селективность к требуемым биологическим объектам. Такие биогибридные наноструктуры обладают рядом преимуществ по сравнению с используемыми на сегодняшний день системами, в которых реализуется эффективное возбуждение поверхностных плазмонов, что позволит создавать на их основе конкурентоспособные сенсорные элементы для высокочувствительного биохимического анализа.

Шульга Кирилл Владимирович, лаборант
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
Тел.: 8(499)1967784; E-mail: zanzius@mail.ru

НЕОБРАТИМЫЙ АСМ-ФИШИНГ БЕЛКОВ

И.Д. Шумов¹⁾, Ю.Д. Иванов¹⁾, В.В. Даничев²⁾, Т.О. Плешакова¹⁾, В.С. Зиборов¹⁾,
Н.В. Крохин¹⁾, М.Н. Загуменный²⁾, В.С. Устинов²⁾, Л.П. Смирнов²⁾, А.И. Арчаков¹⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии медицинских наук Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н.Ореховича РАМН, Москва

²⁾ НИЦ "Курчатовский институт", Москва

Технология АСМ-фишинга белков позволяет регистрировать низкокопийные белки в концентрационном диапазоне ниже 10^{-12} М. Экспериментально был достигнут концентрационный предел детекции пероксидазы хрена на уровне 10^{-17} М. Разработана численная модель для описания кинетики необратимого фишинга молекул низкокопийных белков из раствора на поверхность АСМ-чипа. Предлагаемая модель хорошо описывает экспериментальные данные. Также предложена упрощенная модель расчета кинетики необратимого АСМ-фишинга.

Шумов Иван Дмитриевич
115522, Москва, ул.Погодинская, д.10
Тел.: 8(499)2463761; Факс: 8(499)2450857; E-mail: shum230988@rambler.ru

СЕКЦИЯ II

Поверхности и слоистые наносистемы

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

ВНУТРИЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КОЛЬЦА ВОЛКАНО

Р. Г. Абасзаде, Г. Б. Ибрагимов, А. М. Алиева, Р. З.Ибаева

Институт Физики НАН Азербайджана

Наноструктуры, имеющие геометрию кольцо, представляют значительный интерес, так как открывает уникальные возможности для изучения квантовых интерференционных эффектов. Отметим, что хотя простейшая одномерная (1D) модель кольца и сыграла важную роль в понимании квантовых интерференционных эффектов, она не в состоянии объяснить ряд эффектов, наблюдаемых экспериментально (1,2). В связи с этим подчеркнем, что конечная ширина кольца является одним из самых важных факторов, которые приводят к сложности понимания реальных экспериментов.

Для описания электронных свойств колец использовались различные модели. В частности, к простейшим моделям колец можно отнести модель двумерной или трехмерной проволоки с периодическими граничными условиями (3,4). Используются и более сложные модели для описания конфайнмента кольца такие как потенциал Волкано (5).

В таких кольцах движение электронов вдоль одного направления, перпендикулярного плоскости самого кольца, заморожено в основном состоянии сильным поверхностным потенциалом, поскольку толщина кольца намного меньше, чем внутренний и внешний радиусы кольца. Поэтому в плоскости кольца образуется двумерный электронный газ.

А цель настоящей работы заключалась в исследовании поглощения электромагнитного излучения в кольце с потенциалом конфайнмента Волкано.

1. M. M. Fogler, E. I. Levin, B. I. Shklovski, Phys. Rev. B49, 13767 (1994).
2. J. Simonin, C. R. Proetto, Phys. Rev. B70, 205305(2004).
3. N. F. Johnson, L. Quiroga, J.Phys.Cond.Matter 9, 5889, (1997).
4. V. A. Margulis, A. V. Shorokhov, H. P. Trushin. Physica E10, 518(2001).
5. W. C. Tan, J. C. Lukson. Phys.Rev. B60, 5626 (1999).

Абасзаде Рашад Габил

AZ-1143, Баку, ул. Cavid пр., д. 33

Тел.: +994505312131; E-mail: Abaszade@rambler.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ СПИНОВ В СТРУКТУРЕ [Fe/Cr]_n
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ
МЕТОДОМ ЯДЕРНО-РЕЗОНАНСНОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ**

М.А.Андреева¹⁾, A. Gupta²⁾, G. Sharma²⁾, S. Kamali³⁾, Y. Yoda⁴⁾, K. Okada⁴⁾

¹⁾ *Физический факультет МГУ им. Ломоносова, Москва, Россия*

²⁾ *Indore Center, UGC-DAE Consortium for Scientific Research, India*

³⁾ *Department of Applied Science, University of California, Davis, USA*

⁴⁾ *Japan Synchrotron Radiation Research Institute, SPring-8, Sayo, Japan*

Периодические многослойные пленки с антиферромагнитным межслойным упорядочением, типа [Fe/Cr], [Fe/FeO], [Fe/V] и др., проявляющие эффект гигантского магнитного сопротивления, являются базовыми элементами различных устройств в спинтронике. Поведение подобных структур под влиянием внешнего магнитного поля представляет большой интерес и обнаруживает сложные превращения магнитной структуры [1-3]. Ядерно-резонансная рефлектометрия является наиболее информативным методом исследования профилей изменения по глубине ориентации магнитных моментов в слоях железа [3-4].

В нашей работе проведено исследование пленок [⁵⁷Fe(2.0 nm)/Cr(1.2nm)]₂₀ и [⁵⁷Fe(3.0 nm)/Cr(1.2 nm)]₁₀ на станции BL09 синхротрона Spring-8 (Япония). Образцы были изготовлены в Исследовательском центре г. Индоре (Индия). На угловых зависимостях ядерно-резонансной рефлектометрии хорошо проявились брэгговские максимумы 1/2 и 3/2, соответствующие удвоению магнитного периода. Изменение амплитуды максимума 1/2 начало проявляться при поле, большем 600 э, а именно: наблюдалось увеличение максимума в поле перпендикулярном плоскости рассеяния и уменьшение в продольном поле. Изменения в спектрах ядерно-резонансного рассеяния обнаружили эффект спин-флопа для поверхностного слоя железа в структуре при минимальном поле ~ 50 э.

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-02-01293-а и № 10-02-00768-а.

1. V.V. Ustinov, et al. *Phys. Rev. B* **54** (1996) 15958.

2. J. Meersschaut, et al. *Phys. Rev. B* **73** (2006) 144428.

3. T. Diederich, S. Couet, R. Röhlberger, *Phys. Rev. B* **76**, 054401 (2007).

4. M.A. Andreeva, B. Lindgren, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 125422.

Андреева Марина Алексеевна, д.ф.-м.н., в.н.с.

119991, Москва, Ленинские горы, физический факультет МГУ

Тел.: 8(495)9391226; Факс: 8(495)9328820; E-mail: Mandreeva1@yandex.ru

СОРАЗМЕРНОСТЬ ЗАКОНОМЕРНОГО РЯДА СТРУКТУР ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ВОДЫ И СМАЧИВАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ КАК УСЛОВИЕ ЕЕ СМАЧИВАЕМОСТИ

Н.А. Бульенков, Е.А. Желиговская

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

Если при контакте жидкости с твердой поверхностью поверхностное натяжение жидкости меньше, чем в случае контакта этой жидкости с воздухом, то происходит смачивание данной жидкостью рассматриваемой поверхности. Поэтому при смачиваемости водой молекулы воды со свободными водородными связями на рассматриваемой границе раздела должны образовать водородные связи с гидрофильными группами этой поверхности.

Ранее была предложена модель структуры поверхностного слоя (ПС) воды на границе раздела с газовой фазой и построена закономерная последовательность адаптивных структур, в которые переходит структура ПС при внешнем воздействии, оказываемом на него со стороны контактирующей поверхности [1]. Было высказано предположение, что при смачивании водой грани кристалла структура ПС воды на границе раздела принимает одну из адаптивных структур, параметры которой соразмерны с параметрами смачиваемой грани. Такое условие приводит к максимальному контакту свободных водородных связей ПС с гидрофильными группами контактирующей грани кристалла.

Данное условие соразмерности было проверено для ряда смачиваемых водюю граней кристаллов. Было рассмотрено взаимодействие адаптивных структур ПС воды со смачиваемыми гранями (0001), $(10\bar{1}0)$, $(10\bar{1}1)$ кварца, (0001) и $(10\bar{1}1)$ кальцита, (0001) слюды, (111) ГЦК металлов и другими.

1. Н.А. Бульенков, Е.А. Желиговская // Ж. физ. хим. 2006. Т. 80. № 10, СС. 1784–1805.

Бульенков Николай Николаевич, докт. хим. наук, вед. научн. сотр.
119991, Москва, Ленинский просп., д. 31, к. 4, ИФХЭ РАН
Тел.: 8(495)9554421; Факс: 8(495)9525308; E-mail: lmm@phyche.ac.ru

ФОРМИРОВАНИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ИНТЕРФЕЙСА Co/Si

М.В. Гомоюнова¹⁾, Г.С. Гребенюк¹⁾, И.И. Пронин¹⁾, С.М. Соловьев¹⁾, О.Ю. Вилков²⁾,
Д.В. Вялых²⁾

¹⁾ *Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, С.-Петербург*

²⁾ *Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Dresden*

Формирование интерфейса Co/Si исследуется уже в течение нескольких десятилетий, и это обусловлено широким его использованием в твердотельной электронике, базирующейся на кремниевой технологии. В то же время магнитные свойства данного интерфейса, представляющего большой интерес для развития спинтроники, изучены мало. Цель настоящей работы состояла в установлении взаимосвязи изменений фазового состава, электронной структуры и магнитных свойств этого интерфейса в процессе его образования.

Исследовалось формирование межфазовых границ кобальта с тремя основными гранями кремния – Si(100), Si(110) и Si(111). Эксперименты проводились в условиях сверхвысокого вакуума; пленки Co толщиной до 2 нм наносились на поверхность кристаллов при комнатной температуре. Далее осуществлялся послеростовой отжиг образцов до температур, достигавших 900 К. Элементный и фазовый состав интерфейсов, а также их электронная структура исследовались методом фотоэлектронной эмиссии высокого энергетического разрешения с использованием синхротронного излучения. Характеризация магнитных свойств интерфейсов проводилась *in situ* с помощью линейного магнитного дихроизма в фотоэмиссии Co 3р остовных электронов.

Показано, что для всех исследованных систем порог ферромагнитного упорядочения интерфейсов вдоль поверхности обнаруживается после нанесения примерно 0,6 нм Co. При данном покрытии происходит коалесценция островков твердого раствора кремния в кобальте, которые растут на ультратонком слое интерфейсного силицида кобальта, покрывающем поверхность кремния. Отжиг ферромагнитных пленок Co, образующихся при больших покрытиях, приводит к формированию четырех силицидных фаз (Co₃Si, Co₂Si, CoSi, CoSi₂). При этом сценарии формирования и трансформации указанных фаз специфичны для каждой грани Si.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-02-00643) и Российско-Германской лаборатории в HZB BESSY.

Гомоюнова Марина Владимировна, профессор
194064, С.-Петербург, ул. Политехническая, д.26

Тел.: (812)2927948; Факс: (812)2971017; E-mail: Marina.Gomoyunova@mail.ioffe.ru

СТРУКТУРНЫЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МНОГОСЛОЙНОЙ СВЕРХПРОВОДНИКОВОЙ НАНОСИСТЕМЫ Nb/ α -Si/Nb/ α -Si/Nb

А.Л. Гудков¹⁾, А.И. Козлов¹⁾, А.А. Гогин¹⁾,
А.И. Козлитин²⁾, Е.П. Кириленко²⁾, А.Ю. Трифонов²⁾

¹⁾ ЗАО "Компэлст", Москва, Зеленоград.

²⁾ ФГУП "НИИФП им. Ф.В. Лукина", Москва, Зеленоград.

Планарные джозефсоновские переходы с непосредственной проводимостью (переходы SNS типа) с прослойкой из легированного аморфного кремния имеют наилучшие характеристики по сравнению с другими типами джозефсоновских переходов и являются основой для создания сверхпроводниковых интегральных схем (СПИС) программируемого эталона Вольта и других электронных устройств. Дальнейшее развитие такие переходы получили в виде стеков на основе сверхпроводниковой гетероструктуры Nb/(Nb/ α -Si/Nb) \times n/Nb, где n – целое число. Параметры джозефсоновских переходов и стеков зависят от совершенства и качества отдельных слоев и границ раздела сверхпроводниковой гетероструктуры.

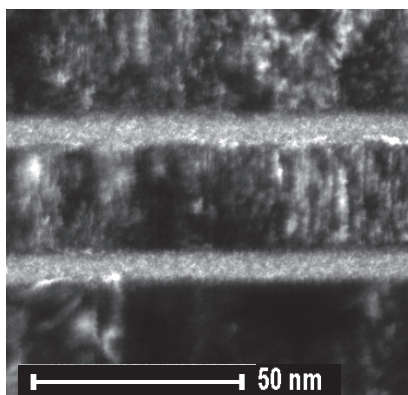


Рис. 1. ПЭМ изображение фрагмента тестовой структуры Nb/ α -Si/Nb/ α -Si/Nb.

В настоящей работе впервые были проведены подробные исследования структуры и элементного состава многослойной наносистемы Nb/ α -Si/Nb/ α -Si/Nb с использованием методов профильного Оже анализа и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ и ПРЭМ) (Рис. 1). Исследованы структура и состав α -Si прослойки, а также базовый слой Nb и шероховатость его поверхности.

Проведенные исследования позволили объяснить характеристики планарных джозефсоновских переходов Nb/ α -Si/Nb, воспроизводимость их параметров и доказали перспективность технологии формирования СПИС на основе стеков планарных джозефсоновских переходов.

Гудков Александр Львович
124460, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д. 6
Тел.: 8(499)7312533; Факс.: 8(499)7315592; E-mail: gudkov@niifp.ru

КОКСОВАНИЕ КАМЕННОУГОЛЬНОГО ПЕКА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ НА ПОВЕРХНОСТИ ЛИСТОЧКОВ ТЕРМОРАСЩЕПЛЕННОГО ГРАФИТА

А.В. Дмитриев

Челябинский государственный университет, Челябинск

Каменноугольный (к/у) пек перед коксованием окисляют кислородом воздуха для увеличения температуры плавления. Кокс из высокоплавкого к/у пека графитируется с образованием трехмерно упорядоченной графитоподобной структуры. Для увеличения ориентации слоев при коксовании использовали окислительное отверждение к/у пека в смеси 10:1 с пухом терморасщепленного графита (ТРГ)^{*)}. Подготовленную шихту размалывали в прессовочный порошок менее 0,5 мм. Лабораторные заготовки диаметром 40 мм обжигали и подвергали высокотемпературной обработке (графитации) в промышленных условиях электродного производства. Свойства материалов при вариации температуры отверждения приведены в таблице.

Температура окислительной обработки, °С	Коксование	Характер структуры	d_{002} , нм	Кажущаяся плотность, г/см ³
225	Жидкостное	Коксоподобная	0,335	0,8
270	Суспензионное	Компактная	0,3385	1,55
450	Твердофазное	Сажеподобная	0,441	1,3

Структура материала образована чередованием слоев кокса, разделенных листочками ТРГ толщиной на порядок меньшей, чем толщина слоев кокса. Установлено, что увеличение температуры окисления выше 250 °С увеличивает межплоскостное расстояние d_{002} до величины, соответствующей пековому коксу. Также подавляется газовыделение при коксовании, заготовки при обжиге спекаются в однородный компактный газонепроницаемый материал, его плотность увеличивается за счет усадки при обжиге и графитации. Отверждение к/у пека выше 300 °С снижает плотность и прочность заготовок с возрастанием d_{002} до величины, соответствующей не графитирующемуся материалу.

^{*)}Дмитриев А.В. Состав и способ изготовления шихты для изготовления углеродного материала // Патент РФ № 2134656. Оpubл. 20.08.99. Бюлл. №23.

Дмитриев Антон Владимирович
454014, Челябинск, ул.Братьев Кашириных, д.129
Тел.: (351)7997070; Факс: (351)7420925; E-mail: admittiev@csu.ru

РЕЗОНАНСНОЕ И НЕРЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЙАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПОЛЯРНЫХ СМЕКТИЧЕСКИХ ФАЗ

П. В. Долганов¹⁾, В. К. Долганов¹⁾, Е. И. Кац²⁾

¹⁾ *Институт физики твердого тела Российской академии наук,
142432, Московская область, Черноголовка*

²⁾ *Laue-Langevin Institute, F-38042, Grenoble, France;*

*Институт теоретической физики имени Л.Д. Ландау Российской
академии наук, 117940 ГСП-1, Москва*

Резонансное и нерезонансное рассеяние синхротронного излучения в последние годы стало основным методом изучения структуры полярных смектических жидких кристаллов. Многообразие слоевых смектических структур образовано изменением от слоя к слою фазы и модуля двухкомпонентного параметра порядка. Фаза параметра порядка характеризует азимутальную ориентацию молекул в различных слоях, модуль параметра порядка – угол наклона молекул. Резонансное рассеяние позволяет определить структуру с изменением фазы параметра порядка, нерезонансное отвечает пространственному изменению модуля параметра порядка. Полное определение структуры полярных фаз возможно при сопоставлении экспериментальных данных с результатами расчётов.

Проведен расчёт структур полярных жидких кристаллов с использованием теории Ландау фазовых переходов [1]. Расчет проведен для структур, в которых происходит пространственное изменение фазы и модуля параметра порядка при учёте межслоевых и фрустрационных взаимодействий. Рассчитаны интенсивности рефлексов в различных фазах, что позволяет определить структуру смектических фаз в экспериментах с использованием синхротронного излучения.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 11-02-01028, 11-02-01424 и гранта Президента Российской Федерации МК-2458.2011.2.

1. P.V. Dolganov, V.M. Zhilin, V.K. Dolganov, and E.I. Kats, Phys. Rev. E **82**, 040701(R) (2010).

СИНТЕЗ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Hg_xPb_{1-x}Se$ МЕТОДОМ ИОННОГО ОБМЕНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Е.А. Дубинина, З.И. Смирнова, Л.Н. Маскаева

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина*

Огромный интерес, проявляемый к селенидам свинца и ртути, обусловлен их уникальными электрофизическими свойствами, используемыми в микро- и оптоэлектронике для создания фотодетекторов и фотоприемных устройств. Замещение ионов свинца в кристаллической решетке селенида свинца на ртуть позволит сформировать твердые растворы в системе $PbSe-HgSe$ с изменяющимися свойствами. Следует отметить, что при получении твердых растворов с участием халькогенидов ртути существует проблема сегрегации компонентов, поэтому традиционно используемые методы получения тонкопленочных поликристаллических твердых растворов халькогенидов металлов не приемлемы для получения твердых растворов в нашей системе.

Нами предполагается использовать методику, суть которой заключается в погружении в водный раствор, содержащий нитрат ртути, иодид аммония и гидроксид натрия, подложки с нанесенной пленкой $PbSe$ на разное время при температурах от 290 до 353 К при изменении концентрации иодида и гидроксида.

Проведенная термодинамическая оценка возможности осуществления реакции ионного замещения свинца в твердой фазе пленки $PbSe$ на Hg из водного раствора, содержащего иодидный комплекс ртути, свидетельствует о высокой вероятности осуществления этого процесса ($\Delta G_{298}^{\circ} \approx -120$ кДж/моль).

Данные рентгенофазного анализа свидетельствуют о том, что все нетермообработанные слои, полученные ионным замещением, являются однофазными. Зафиксировано присутствие только одной кристаллической фазы $PbSe$ кубической структуры $B1$. На полученных рентгенограммах пленок $PbSe-HgSe$ наблюдается смещение всех рефлексов в сторону больших углов с уменьшением периода, характерного для базового материала- $PbSe$. Это свидетельствует о том, что произошло образование твердого раствора замещения в системе $PbSe-HgSe$.

Дубинина Евгения Андреевна
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19, УрФУ
E-mail: zeny_a_dubinina@e1.ru

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ПОРФИРИН- ФУЛЛЕРЕНОВЫХ ДИАД

Ю.А. Дьякова¹⁾, А.С.Орехов¹⁾, А.Ю. Серегин¹⁾, С.Н. Якунин³⁾, Е.И. Суворова¹⁾, В.В. Ключковская¹⁾, А.С. Алексеев²⁾, Е.Ю. Терещенко¹⁾, Н.В. Ткаченко⁴⁾, Х. Лемметюнен⁴⁾, М.В. Ковальчук¹⁾

¹⁾Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова, РАН, Москва

²⁾Учреждение Российской академии наук Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН, Москва

³⁾ НИЦ Курчатовский институт, Москва

⁴⁾Технологический Университет, Тампере, Финляндия

В настоящее время создание новых устройств и разработка новых материалов для фотовольтаики становится одним из приоритетов для работ в области нанотехнологий и возобновляемых источников энергии.

Целью настоящей работы являлось исследование структуры органических монослойных пленок порфирина-фуллереновых диад - молекулярных систем, способных к фотоиндуцированному разделению зарядов, являющихся перспективными функциональными элементами для новых фотовольтаических приборов.

Монослои формировались на поверхности водной субфазы, а затем переносились на твердые подложки методом Ленгмюра-Шеффера.

Исследования структурных свойств молекулярных пленок проводились методами рентгеновской рефлектометрии, стоячих рентгеновских волн в области полного внешнего отражения с использованием СИ, электронной микроскопии и электронографии. Полученные экспериментальные данные сопоставлялись с результатами моделирования упаковки молекул в монослой, на основе данных изотермы сжатия.

Предложена модель элементарной ячейки, подтвержденная экспериментальными данными. Определены толщины мономолекулярных слоев. Получена ориентация молекул донорно-акцепторных диад в монослоях на твердой подложке.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки ГК № 02.527.12.0004

Дьякова Юлия Алексеевна

119333, Москва, Ленинский пр-т, д.59

Тел.: 8(499)1350251; Факс: 8(499)1351011; E-mail: juliaadi@gmail.com

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ ТОКОНЕСУЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ ВТСП ПРОВОДОВ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

М.Л. Занавескин, И.А. Черных, Ю.В. Грищенко, В.В. Роддатис, А.Н. Марченков,
А.К. Шиков, М.В. Ковальчук

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Сверхпроводящие высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) провода второго поколения весьма привлекательны для целого ряда коммерческих приложений. К ним относятся проекты по разработке передачи электроэнергии по кабельным сетям, разработке провода для электромагнитов и различного рода моторов, а также других применений, в которых использование ВТСП материалов приводит к уменьшению веса, габаритов, шумов и поглощаемой мощности по сравнению с аналогичными параметрами своих несверхпроводящих аналогов.

Настоящая работа посвящена созданию прототипов токонесущих элементов ВТСП проводов второго поколения. Нанесение буферных слоев и ВТСП слоя проводилось методом импульсного лазерного осаждения. В качестве подложки были использованы биаксиально текстурированные ленты из сплава Ni 96% + W 4% с углом разориентации текстуры $6-8^{\circ}$, предоставленные ВНИИНМ им Бочвара. Были исследованы различные варианты архитектуры буферных покрытий, состоящие из трех слоев: затравочного, барьерного и завершающего, обеспечивающих возможность эпитаксиального роста сверхпроводящего слоя $YBa_2Cu_3O_{7-x}$. Диагностика полученных гетероструктур проводилась с использованием комплекса методик, включая рентгеноструктурные методы, растровую и просвечивающую электронную микроскопию, дифракцию обратно рассеянных электронов, атомно-силовую микроскопию, измерение сверхпроводящих свойств. В результате были получены образцы прототипов токонесущих элементов ВТСП проводов с температурой перехода в сверхпроводящее состояние $90^{\circ} K$.

Занавескин Максим Леонидович, начальник отдела прикладных нанотехнологий
НИЦ «Курчатовский институт»
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1
Тел.: (499)1967784; E-mail: zml@bk.ru

СТРУКТУРА, СОСТАВ, МОРФОЛОГИЯ И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК PbS, ДОПИРОВАННЫХ ГАЛОГЕНАМИ

И.В. Зарубин, Л.Н. Маскаева, В.Ф. Марков

*ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н. Ельцина*

Важное место среди полупроводников принадлежит халькогенидам тяжелых металлов. Благодаря уникальному комплексу электронных и оптических свойств сульфид свинца на протяжении десятилетий является базовым материалом микро- и оптоэлектроники. В данной работе представлены результаты исследований структуры, состава, морфологии и чувствительных свойств пленок сульфида свинца, допированных галогенами (Cl₂, Br₂, J₂), к ионам свинца в растворе.

Пленки были получены из аммиачно-цитратной системы гидрохимическим осаждением с добавками галогенидов аммония от 0.05 до 0.2 М. Был проанализирован состав поверхности пленок при использовании Оже-электронной спектроскопии. Элементный анализ пленок показал, что содержание галогенов от хлора к йоду увеличивается в среднем от 1.6 до 2.8 ат. %. Анализ, выполненный по электронно-микроскопическим изображениям, показал, что от хлора к йоду повышается однородность микроструктуры и удельная поверхность пленок. Размер микрокристаллитов при добавках Cl₂, Br₂, J₂ составил 170 нм, 120 нм и 40 нм соответственно.

Проанализировав выше приведенные результаты, были исследованы сенсорные свойства датчиков, изготовленных из данных материалов, к ионам свинца в растворе. В качестве электрода сравнения использовали хлорсеребряный электрод. Для анализа был подготовлен концентрационный ряд растворов с содержанием свинца от $1.5 \cdot 10^{-8}$ до $1.5 \cdot 10^{-2}$ М. Э.Д.С. электродной пары ХСЭ – датчик измерялась мультиметром В7-62. Разность потенциала (во всем концентрационном ряду) датчиков, сделанных из пленок, содержащих Cl₂, Br₂, J₂, составляет 63 мВ, 86 мВ и 146 мВ соответственно.

Данные исследования показывают возможность получения пленок сульфида свинца с заданными как фотоэлектрическими, так и сенсорными свойствами, что расширяет границы их применения.

Зарубин Иван Владимирович

620002, Екатеринбург, Мира, д.28

Тел.: 8(904)5446628; Факс: (499)4331511; E-mail: ivan-carevich85@mail.ru

АТОМАРНЫЙ ВОДОРОД КАК КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ ОБРАЗОВАНИЯ ТОНКОПЛОЧНЫХ МЕДНО-ГЕРМАНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А.И.Казимиров, Е.В.Ерофеев, В.А.Кагадей

*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Томск*

Основным недостатком известных в настоящее время способов получения медно-германиевых соединений является использование термического отжига при высоких температурах (до 400 °С) в течение 30 минут. В настоящей работе рассматривается возможность низкотемпературного получения тонкопленочных медно-германиевых соединений при использовании обработки их исходных компонентов (пленок Ge и Cu, последовательно нанесенных на полупроводниковые подложки GaAs) в потоке атомарного водорода. Исследовав поверхности и поперечные сечения образцов с помощью сканирующей электронной микроскопии, нам удалось установить, что поверхность Cu/Ge/GaAs образца после напыления характеризуется мелким, неразвитым рельефом, а в сечении видна четкая граница между германием и медью. Поверхности образцов, после формирования медно-германиевых соединений, полученных при использовании высокотемпературного отжига в течение 30 минут и обработкой в потоке атомарного водорода в течение 5 минут при комнатной температуре, имеют развитый рельеф с одинаковой морфологией. Одинаковыми являются и поперечные сечения соединений, полученных обоими способами: происходит полное взаимодействие слоев Cu и Ge, приводящее к образованию медно-германиевого соединения с вертикально ориентированными зернами. Изменение рельефа и поперечного сечения образцов, полученных обоими способами, относительно исходного образца, обусловлено протеканием твердофазных реакций между Cu и Ge в течение процесса формирования соединения. При этом формирование соединения при использовании обработки в потоке атомарного водорода происходит при комнатной температуре и в течение меньшего времени.

Казимиров Артем Игоревич
634041, Томск, ул. Кирова, д. 56А
Тел.: 8(923)4079364, E-mail: smart300389@mail.ru

**ИССЛЕДОВАНИЯ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО И
ПРОФИЛИРОВАННОГО КРЕМНИЯ В РАСТВОРЕ ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ
МЕТОДАМИ XANES И SEM**

В.М. Кашкаров, А.С. Леньшин, П.В. Середин, Б.Л. Агапов, В.Н. Ципенюк,
Э.П. Домашевская

Воронежский государственный университет, Воронеж

В работе проведено исследование электронного строения и морфологии пористого кремния, полученного электрохимическим травлением кремния (100) п-типа, при различных составах травителя, а также профилированного кремния, изготовленного методом химического травления, до и после дополнительной обработки в водном растворе полиакриловой кислоты (ПАК).

Методами XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) и SEM (Scanning Electron Microscopy) установлено влияние обработки поверхностных слоев кремниевых структур в ПАК. Морфология и состав поверхности пористого и профилированного кремния под действием ПАК модифицируются по-разному, в зависимости от технологии получения образцов. Обработка в ПАК образцов пористого кремния с порами диаметром до 200 нм приводит к сглаживанию рельефа и доокислению его поверхности. Обработка в ПАК образцов профилированного кремния приводит к разупорядочению атомной структуры поверхностного слоя кристаллического кремния. Для образцов пористого кремния с размерами пор до 500 нм обработка в ПАК приводит к значительному уменьшению толщины поверхностного оксида и вскрытию кристаллического кремния. Во всех случаях обработка в ПАК приводит к повышению гидрофильности поверхности образцов, особенно значительному в случае кремния с наибольшими размерами пор.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013. Данная работа выполнена на The Synchrotron Radiation Center, University Of Wisconsin-Madison, который поддерживается NSF грант No. DMR-0537588.

Кашкаров Владимир Михайлович, доцент
394006, Воронеж, Университетская пл., д.1
Тел.: (473)2208363; Факс: (473)2208363; E-mail: ftt@phys.vsu.ru

СТРУКТУРНЫЕ И МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОКРИСТАЛЛОВ RVO_3 , СИНТЕЗИРОВАННЫХ В ТОНКИХ СЛОЯХ СВИНЦОВО-БОРАТНЫХ ОКСИДНЫХ СТЕКОЛ

В.В.Кедров, И.М.Шмытько, С.З.Шмурак, Е.А.Кудренко, Н.В.Классен

Институт физики твёрдого тела Российской Академии Наук, Черноголовка

Методами рентгеновской дифрактометрии и электронной сканирующей микроскопии обнаружено сильное ориентирующее влияние тонких слоёв (2,5-20 нм) расплавов некоторых свинцово-боратных оксидных стёкол на кристаллиты YVO_3 and LuVO_3 , синтезированные в этих стеклах при взаимодействии наноразмерных порошков исходных оксидов иттрия и лютеция с борным ангидридом. Результатом ориентирующего действия тонких слоев расплава свинцово-боратного оксидного стекла является образование ярко выраженной текстуры кристаллитов полученных ортоборатов с осью текстуры вдоль направления [001], параллельной нормали к подложке.

Люминесцентные и сцинтилляционные измерения полученных текстурированных ортоборатных систем, активированных Ce^{3+} ионами, показали значительный уровень светового выхода при возбуждении рентгеновским излучением и от источника Cs^{137} (661 КэВ). Полученные люминесцентные и сцинтилляционные характеристики свидетельствуют о возможности использования свинцово-боратных оксидных стекол в качестве связующих при создании тонкослойных стеклокристаллических люминофоров на основе ортоборатов иттрия и лютеция.

Кедров Виктор Викторович, в.н.с., д.т.н.
142432, г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д.2
Тел.: (496)5225485; E-mail: kedr@issp.ac.ru

**РЕНТГЕНОВСКИЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛИ-И
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВАНАДИЙЗАМЕЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ
ХРОМА-МЕДИ**

Е.В. Коротаев¹⁾, Л.Н. Мазалов^{1),2)}, В.В. Соколов¹⁾, Диков Ю.П.⁴⁾, И.Ю. Филатова¹⁾,
Н.А. Крючкова^{1),2)}, С.А. Лаврухина³⁾, Н.Н. Перегудова¹⁾, А.В. Михеев¹⁾

¹⁾ *Институт неорганической химии им. Николаева Сибирского отделения
российской академии наук, Новосибирск*

²⁾ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

³⁾ *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск*

⁴⁾ *Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии
и геохимии РАН, Москва*

Слоистый дисульфид хрома-меди CuCrS_2 относится к классу магнитных полупроводников, в которых при повышенных температурах наблюдается смешанный электрон-ионный механизм проводимости. При этом благодаря своей структуре, представляющей собой чередующиеся слои S-Cr-S, между которыми в Ван-дер-Вальсовой щели располагаются слои меди, CuCrS_2 является интересной платформой для создания материалов с различными магнитными и электрическими свойствами. Замещение атомов хрома атомами ванадия позволяет управлять свойствами соединения ($\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$, $x=0\div 0.4$) и приводит к переходу металл-диэлектрик, увеличению вклада ионной проводимости, к появлению колоссального магнетосопротивления.

Нами были проведены комплексные рентгеновские и рентгеноэлектронные исследования поли- и монокристаллических образцов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x=0\div 0.4$). Для этого были изучены фотоэлектронные $2p_{3/2,1/2}$ и рентгеновские эмиссионные $K_{\alpha 1,2}$ -линии меди, хрома, ванадия, серы, $K_{\beta 1,x}$ -линии серы, $L_{\alpha 1,2}$ -линии меди, хрома, ванадия. Рентгеновские эмиссионные линии были построены в единой энергетической шкале, что позволило получить сведения о строении валентной зоны изучаемых соединений.

Коротаев Евгений Владимирович

630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.3

Тел.: (383)3165341; Факс: (383)3309489; E-mail: Jodow@rambler.ru

СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР $Al_2O_3/SiO/Al_2O_3/SiO...Si$

Д.А.Коюда¹⁾, С.Ю.Турищев¹⁾, В.А. Терехов¹⁾, К.Н. Панков¹⁾, Э.П. Домашевская¹⁾,
А.В. Ершов²⁾, А.И. Машин²⁾

¹⁾ *Воронежский государственный университет, Воронеж*

²⁾ *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Н. Новгород*

В данной работе проведены исследования многослойных нанопериодических структур $Al_2O_3/SiO/Al_2O_3/SiO...Si$ при помощи спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray Absorption Near Edge Structure). Экспериментальные образцы были получены методом последовательного нанесения слоев SiO и Al_2O_3 на монокристаллические пластины кремния Si (100). Толщины слоев Al_2O_3 во всех партиях образцов составляли порядка 5 нм, тогда как слои SiO варьировались от 4 до 10 нм, число периодов равно 9. Были проведены отжиги исследуемых структур при температурах 500, 700, 900 и 1100 °С. Экспериментальные рентгеновские спектры XANES вблизи L краев поглощения Si и Al были получены на канале Mark V Grasshopper синхротрона SRC (Synchrotron Radiation Center) Университета Висконсин - Мэдисон, штат Висконсин, г. Стоутон, США. Глубина информативного слоя при получении указанных спектров составляла ~ 5 нм. Вакуум в экспериментальной камере спектрометра составлял 10^{-10} Торр.

В работе показано формирование нанокластеров кремния в поверхностных слоях МНС при их высокотемпературном отжиге, продемонстрировано возможное образование алюмосиликатов. Также обнаружены эффекты аномального обращения интенсивности спектров XANES при взаимодействии синхротронного излучения (СИ) со слоистой структурой МНС.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы. Данная работа частично выполнена на The Synchrotron Radiation Center, University Of Wisconsin-Madison, который поддерживается NSF грант No. DMR-0537588.

Коюда Дмитрий Анатольевич
394006, Воронеж, Университетская пл., д.1
Тел.: (473)2208363; Факс: (473)2208363; E-mail: ftt@phys.vsu.ru

ОСОБАЯ «РЕЗОНАНСНАЯ» ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ УПРУГО-ВОЛНОВОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ *Al-Ti*-НАНОСИСТЕМ

Е.М.Кудрявцев¹⁾, С.Д.Зотов¹⁾, А.А.Лебедев¹⁾, А.Ф.Попович²⁾, В.Г.Ральченко²⁾, П.А.Цыганков³⁾

¹⁾ *Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Москва;*

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

³⁾ *Гос. технический университет им. Баумана, Москва*

Продолжено исследование эффекта наложения необычных и значительных (~15%) колебаний температуры T на давно известный процесс температуропроводности в облучённых лазерным импульсом образцах наносистем из металлических многослойных **Al-Ti** - плёнок. T -колебания затрудняют проведение анализа результатов стандартной процедуры измерения теплопроводности. Получены новые подтверждения, что причиной указанных T -колебаний в таких системах является влияние Медленных уединённых упругих волн (МУУВ) с дискретными скоростями, многократно проходящих через рассматриваемые слоистые нано-структуры. МУУВ - явление, обнаруженное в ФИАНе (1992 г). Использовались образцы многослойных структур, изготовленных в МВТУ и в НИСТ США, дающих согласующиеся результаты. В ходе исследования образцов в интервале $-100^{\circ}\text{C} < T < +200^{\circ}\text{C}$ выяснилось, что имеется необычная T -зависимость *как амплитуды колебаний, так и частоты* самих колебаний. Так, (на примере для неотожжённых образцов), самое значительное их совместное увеличение зафиксировано для $T=25^{\circ}\text{C}$; при высоких T ($50, 75, 100^{\circ}\text{C}$) период остаётся неизменным и совпадает с периодом при $T = -50^{\circ}\text{C}$. Рассмотрение совокупности T -зависимостей многократных прохождений волн типа МУУВ через **Al-Ti** структуру показало, что здесь наблюдаются процессы, весьма похожие на «настройку» упругих уединённых волн (с дискретными скоростями) для распространения в солитонном режиме. В результате из многих режимов лишь несколько, лежащих в сравнительно узком T -диапазоне, оказываются соответствующими для того, чтобы волны типа МУУВ стали близки солитонным. Авторы благодарят Д.Джоселля (НИСТ США) за предоставление образцов многослойных плёнок многочисленные обсуждения; В.И.Емельянова (МГУ, Москва) за обсуждения экспериментальных результатов. Работа поддерживается грантом РФФИ по проекту 10-08-01003(а).

Кудрявцев Евгений Михайлович, в.н.с, д.ф.-м.н.
119991, Москва, Ленинский просп., 53, Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
Тел.: (499)1326455; E-mail: kudriavt@sci.lebedev.ru

СОЗДАНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОПРОВОДОВ ИЗ СОБСТВЕННОГО ОКСИДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПРОТОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Л.В.Кутузов, Б.А.Гурович, К.Е.Приходько, А.Г.Домантовский, А.Н.Талдёнков

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

В работе продемонстрирован способ создания нанопроводов из висмута, основанный на локальном изменении химического состава оксида под действием протонного облучения через литографическую маску. Комплекс методов селективного изменения свойств материалов под действием ионного облучения был разработан в НИЦ «Курчатовский институт»[1,2]. Геометрия маски задавалась посредством высокоразрешающей электронной литографии. Были получены проводящие структуры из висмута с шириной 40-150 нм, длиной 10 мкм и толщиной 15 нм. Процесс восстановления металла проводился с использованием пучка протонов с энергиями 400, 800 и 1600 эВ. Также варьировалось расстояние между соседними проводами, с целью нахождения минимального расстояния, при котором не будет происходить замыкания пар проводников.

Были измерены электрические характеристики как полученных наноструктур, так и сплошных плёнок восстановленного металла. Удельное электрическое сопротивление и холловскую ЭДС на плёночных образцах измеряли методом Ван дер Пау. Получены зависимости увеличения сечения наноразмерных проводников (по сравнению с отверстиями в резистивной маске) в результате рассеяния ионного пучка в слое оксида висмута при различных значениях энергии падающих протонов. Показано, что метод радиационно-индуцированного изменения атомного состава эффективен при создании нанопроводов из висмута в матрице диэлектрика с высоким удельным сопротивлением.

1. Gurovich B.A. et al // Proc. SPIE.V.6260,P.626005 (2006).
2. Гурович Б.А.,Приходько К.Е.//УФН.Т.179, №2, С.179 (2009)

Кутузов Леонид Вячеславович
123182, Москва, площадь академика Курчатова, д.1, НИЦ «Курчатовский институт»
Тел.: 8(499)1969215; Факс: 8(499)1961701; E-mail: kutuzov@irtm.kiae.ru

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОКЛАСТЕРОВ И ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА СИЛИКАТАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ CO₂ ЛАЗЕРА

А.Ф. Мухамедгалиева¹⁾, А.М. Бондарь¹⁾, М.А. Кононов²⁾, В.Б. Лаптев³⁾,
Н.Н.Новикова³⁾, И.М. Шведов¹⁾,

¹⁾ *Московский государственный горный университет, Москва .*

²⁾ *Институт Общей физики РАН, Москва .*

³⁾ *Институт спектроскопии РАН, Московская область, г. Троицк*

Исследуются нанокластеры и периодические микронные структуры, возникающие на поверхности плавленного и кристаллического кварца а также некоторых природных силикатов под действием излучения импульсного CO₂ лазера с длительностью импульса 70 нм и с энергией в импульсе 1 Дж. Особенностью действия излучения CO₂ лазера на силикаты является сильное поглощение ИК лазерного излучения силикатами, связанное с резонансным взаимодействием инфракрасного лазерного излучения с валентными колебаниями атомов в силикатной матрице. Действие сфокусированного излучения CO₂ лазера с плотностью мощности большей, чем 10⁵ Вт/см², ведет к появлению интенсивной абляции материала а также к модификации облучаемой поверхности.

Образцы облучались CO₂ лазером в двух режимах - одномодовом с потоком энергии 5,2 Дж/см² и многомодовом с потоком энергии 48 Дж/см² и при двух значениях частоты лазера - 975 и 1076 см⁻¹. Для изучения особенностей образования нано- и микроструктур привлечены оптические микроскопические, атомно-силовые микроскопические а также ИК спектроскопические исследования облученных образцов. Обнаружено, что в условиях одномодового режима при потоке энергии порядка 5,2 Дж/см² и при воздействии единицами импульсов с длительностью - 70 нм на поверхности силикатов образуются микронные периодические структуры, период которых зависит от частоты лазерного воздействия. При многомодовом режиме воздействия и при большем потоке энергии - 48 Дж/см² возникают кроме того и наноструктуры размером 100-150 нм, концентрация и рельеф которых зависит от частоты лазерного воздействия.

Формирование рельефа на поверхности связано с интенсивной абляцией в области максимума стоячей волны, образованной в результате интерференции падающей и поверхностной волн, возникающих в резонансной поглощающей среде.

Мухамедгалиева Анель Фазуловна
119991, Москва, Ленинский пр. 6.

Тел.: 8(499)2302504; Факс: 8(499)2302412; E-mail: anel-mggu@mail.ru

ДИФРАКЦИЯ ОБРАТНО РАССЕЯННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ИССЛЕДОВАНИИ ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ ВЫШЕГО СИЛИЦИДА МАРГАНЦА

А.С. Орехов¹⁾, Ф.Ю. Соломкин²⁾, Е.И. Суворова¹⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва

²⁾ Учреждение Российской академии наук Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Высший силицид марганца (BCM) $MnSi_{1,7}$ может использоваться как высокотемпературный термоэлектрик (рабочая температура до 1000°C). Легирование германием кристаллов BCM улучшает их термоэлектрические свойства, хотя изменения имели сложный характер. Причиной этого может быть образование выделений Ge-Si разного размера, формы и с разным соотношением элементов. В данной работе помимо Ge для легирования использовались также Mo и Al и основной целью работы было структурное исследование выращенных кристаллов BCM.

Характер вхождения примесей в кристаллы BCM исследовался методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновского микроанализа и дифракции обратно рассеянных электронов на микроскопе Quanta 200 3D (FEI, Netherlands), оборудованном соответствующими детекторами. Преимуществом такого комплексного подхода является возможность проведения неразрушающего контроля элементного и фазового состава на достаточно больших площадях (несколько кв. см).

Анализ показал, что в процессе роста по методу Бриджмена формируется кристалл с составом Mn_4Si_7 . Установлено, что легирующие примеси образуют в кристалле BCM выделения разной формы размерами от десятков нанометров до сотен микрон. Наблюдалась монокристаллические выделения твердого раствора Si-Ge с разным соотношением Si/Ge, имеющие округлую и зачастую нерегулярную форму, Mo образует выделения, состав которых соответствует дисилициду молибдена. Алюминий присутствует в виде оксида в порах матрицы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Ведущих научных школ (грант НШ-4034.2010.5)

Орехов Андрей Сергеевич, м.н.с.
119333, Москва, Ленинский пр. 59
тел.: 8(499)1353500; E-mail: Andrey.orekhov@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МОДИФИКАЦИИ МЕТАМОРФНОГО БУФЕРА НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА НЕМТ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР НА ПОДЛОЖКЕ GaAs (1 0 0)

С. С. Пушкарёв^{1), 2)}, И. С. Васильевский²⁾, Г. Б. Галиев¹⁾, Р.М. Имамов^{1), 3)},
Е. А. Климов¹⁾, О. А. Рубан^{1), 2)}, И. А. Субботин³⁾, Е. И. Суворова³⁾

¹⁾ *Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН, Москва*

²⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

³⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

НЕМТ наногетероструктуры на подложках InP сегодня являются базовым материалом СВЧ электроники на частоты выше 100 ГГц. Технологически более привлекательны альтернативные им метаморфные наногетероструктуры на подложках GaAs с содержанием InAs в квантовой яме от 52% и выше.

В данной работе представлены результаты исследований структурных и электрофизических характеристик НЕМТ наногетероструктур $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$, выращенных методом МЛЭ на подложках GaAs с использованием метаморфного буфера (ММБ) трёх разных конструкций. Исходной являлась структура с ММБ $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ толщиной 1.08 мкм с плавным линейным увеличением x по толщине с инверсной ступенью в конце. В следующих образцах ММБ был модифицирован путём: а) увеличения его толщины (до 1.50 мкм); б) введением внутрь ММБ двух напряжённых сверхрешёток $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$; в) введением внутрь ММБ двух дополнительных инверсных ступеней (ИС) с последующими залечивающими слоями.

Подвижность и концентрация электронов измерялись методом Ван дер Пау при температурах 300 К и 77 К. Структурные характеристики выращенных образцов исследовались методами рентгеновской дифракции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии. Установлено наличие связи электрофизических свойств со структурными параметрами. Показано, что наиболее высокое качество наногетероструктур обеспечивается введением внутрь ММБ сверхрешёток, являющихся геттерами для прорастающих дислокаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 21, проекта ФЦП "Кадры" №НК-616П(39) и гранта РФФИ (11-07-00050).

Пушкарёв Сергей Сергеевич, инженер-исследователь
117105, Москва, Нагорный проезд, д.7, стр. 5
Тел.: 8(916)8239722; Факс: 8(499)1236222; E-mail: s_s_e_r_p@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ НАНОСТРУКТУРЫ ТВЕРДОГО АЛМАЗОПОДОБНОГО ПОКРЫТИЯ НА ЛЕНТЕ ИЗ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ

А.Ю. Рашковский¹⁾, А.И. Ковалев¹⁾, Д.Л. Вайнштейн¹⁾, Х.Л. Эндрино²⁾

¹⁾ *Научно-Техническое Внедренческое Предприятие «Поверхность»,
Москва*

²⁾ *Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid, Madrid, Spain*

На ленту из нержавеющей стали методом ионно-плазменного напыления наносили многослойное твердое покрытие из слоев карбонитрида титана, кремния и алмазоподобной углеродной пленки. Методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионного рентгеновского микроанализа, фотоэлектронной и Оже-спектроскопии исследовали особенности структуры и фазового состава износостойкого покрытия. Установлено, что TiCN покрытие имеет нанокристаллическую столбчатую структуру с зернами, достигающими 50 нм в поперечнике. Адгезионный слой Si эпитаксиально растет на TiCN субстрате. Слой алмазоподобного углерода имеет сложное модулированное кластерное строение.

Структура пленки сформирована по механизму подобному спинодальному распаду в условиях высокой скорости осаждения покрытия при напылении. По данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии установлено, что в структуре пленки кластеры с sp²- и sp³-гибридизацией присутствуют в отношении 11:9. Анализ ближайшего атомного окружения подтвердил наличие в структуре покрытия как графитных так и алмазных межатомных связей углерода.

С помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло была получена возможная конфигурация размещения атомов углерода в покрытии. Эта модель показывает слоистую структуру расположения графитных и алмазных атомных плоскостей. Было показано, что комплекс исследованных свойств соответствует оптимальному, для использования твердого покрытия его в качестве износостойкого на нержавеющей стали.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований 11-02-93981-ИНИС_a

Рашковский Александр Юльевич
105005, Москва, ул. 2ая Бауманская, д.9/23, комн. 475
Тел.: 8(495)7779344; Факс: 8(495)7779344; E-mail: a_rashkovskiy@sprg.ru

ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

Б.С. Рошин¹⁾, В.Е. Асадчиков¹⁾, В.В. Волков¹⁾, Ю.О. Волков¹⁾,
К.А. Дембо¹⁾, И.В. Кожевников¹⁾, А.М. Тихонов²⁾, Д.А. Фролов¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Институт физических проблем РАН, Москва*

Кремнезоль (раствор наночастиц оксида кремния в воде) образует с воздухом поляризованную границу раздела. Толщина слоя наночастиц вблизи поверхности может достигать значений 30 – 100 нм. В работе методом рентгеновского рассеяния были исследованы границы раздела воздух-вода и воздух-кремнезоль. По этим данным рассчитаны функции спектральной плотности мощности шероховатости поверхностей. Среднеквадратичная высота шероховатости для поверхности воды составила 0,26 нм, а для кремнезоля 0,57 нм.

Методом рефлектометрии изучено строение широкого переходного слоя на границе водного раствора наночастиц оксида кремния с распределением по размерам, определенного методом малоуглового рассеяния. Восстановленный профиль распределения электронной плотности указывает на наличие сложной структуры границы раздела. При этом отмечается наличие слоя из наночастиц глубиной до 300 нм, что более чем на 50% превышает значения, зафиксированные ранее.

Рошин Борис Сергеевич
119333, Москва, Ленинский пр-т, д.59
Тел.: 8(499)1352200; Факс: 8(499)1351011; E-mail: ross@crys.ras.ru

НEXAFS ИССЛЕДОВАНИЯ СЛОЕВ ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ЖЕЛЕЗА НА ПОВЕРХНОСТИ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

В.Н. Сивков¹⁾, С.В. Некипелов²⁾, Б.С. Каверин³⁾, А.М. Обьедков³⁾, В.А. Егоров³⁾,
А.И.Кирилов³⁾, О.В. Петрова¹⁾, Д.В. Вялых⁴⁾, С.Л. Молодцов⁴⁾

1) Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

2) Коми педагогический институт, Сыктывкар

3) Учреждение Российской академии наук институт

металлоорганической химии имени Г.А.Разуваева, Нижний Новгород

4) Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden

Благодаря своим уникальным физико-химическим и механическим свойствам многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) являются основой для создания различных композиционных материалов. В настоящее время получило широкое использование поверхностных свойств композитов на основе МУНТ в качестве сорбентов и катализаторов. В связи с этим модифицирование поверхности МУНТ неорганическими и органическими покрытиями, в частности, 3d – переходными металлами является актуальным. В нашем случае покрытие из пиролитического железа формировалось методом химического газофазного осаждения – CVD (Chemical Vapor Deposition) из металлоорганических соединений (МОСVD-метод) под воздействием температуры.

В работе проведено изучение ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (near edge x-ray absorption fine structure, NEXAFS) нанокompозита МУНТ - пиролитическое железо с использованием синхротронного излучения (СИ) на выходе Русско-Немецкого канала монохроматизации СИ на BESSY-II. В результате исследований получена информация о структурных особенностях, толщине, химическом состоянии и атомном составе тонкопленочного покрытия и интерфейса МУНТ - пиролитическое железо. Показано, что внешняя поверхность МУНТ не испытывает существенных изменений, слой пиролитического железа представляет собой Fe₃O₄, взаимодействие слоя и поверхности МУНТ осуществляется через образование одинарных и двойных C-O связей.

Сивков Виктор Николаевич, профессор

167982, Сыктывкар, ул.Коммунистическая, д.24

Тел.: (8212)246242; Факс: (8212)242264; E-mail: svn@dm.komisc.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛЬТАМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЕНОК ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ В ОБЛАСТИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

П.А. Форш¹⁾, Н.Л. Левшин¹⁾, С.В. Хлыбов¹⁾, С.Г. Юдин²⁾

¹⁾Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва.

²⁾Институт кристаллографии Российской Академии Наук, Москва.

В предыдущих работах нами был обнаружен фазовый переход в ленгмюровских пленках, изготовленных на основе жидкого кристалла ТДОБАМБЦЦ (паратетрадецилоксибензилиденамино-2-метилбутилцианоцинномат). Проведенные оптические измерения, а также изучение температурной зависимости электроемкости позволяют утверждать, что мы имеем дело с фазовым переходом сегнетоэлектрик-параэлектрик. В настоящей работе была поставлена задача изучения вольтамперных характеристик на постоянном и переменном токе при различных температурах. Исследовались пленки толщиной 10 монослоев, полученные методом Шефера. Измерения проводились как на постоянном токе, так и на переменном в области частот 5 Гц-10 кГц. При измерениях на постоянном токе характер вольтамперных характеристик изменялся вблизи обнаруженного фазового перехода (~70°C). Сопротивление образца возрастало при этой температуре и слабо уменьшалось при повышении температуры. Такое поведение сопротивления соответствует ожидаемым изменениям этой величины при сегнетоэлектрическом фазовом переходе «порядок-беспорядок». Разупорядочение направления дипольных моментов, по-видимому, препятствует прохождению электрического тока. Вольтамперные характеристики, измеренные на переменном токе, не имели существенных изменений формы при температуре фазового перехода. При переходе из сегнетоэлектрической в параэлектрическую фазу сопротивление пленки плавно увеличивалось примерно вдвое, что качественно совпадает с результатами, полученными на постоянном токе. Нелинейности вольтамперных характеристик наблюдались при всех температурах при измерениях на частоте $f < 1$ кГц. Можно предположить, что при измерениях на переменном токе все эффекты сглаживаются за счет меньшего влияния разупорядочения дипольных моментов на емкостную составляющую проводимости.

Форш Павел Анатольевич, доцент, к. ф.-м. н.
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
Тел.: 8(495)9393922; E-mail: forsh@vega.phys.msu.ru

АНАЛИЗ ВНУТРЕННИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР ПО ИНТЕНСИВНОСТИ ОТРАЖЕННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Р.В. Хачатуров

Вычислительный Центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва

В работе предлагаются математические модели и методы, позволяющие по угловому спектру интенсивности отраженного рентгеновского излучения (РИ) определять величину межслойной шероховатости (толщину переходного слоя) и другие параметры многослойных наноструктур. Одним из основных параметров многослойных наноструктур является качество границ раздела, которое сильно зависит от механизмов и динамики роста таких структур. Анализ экспериментально полученных угловых спектров интенсивности отраженного рентгеновского излучения является одним из наиболее адекватных методов определения статистических характеристик неоднородностей внутренних границ раздела, позволяющим, например, проводить неразрушающий контроль качества наноструктур. Предлагаемая математическая модель для решения прямой задачи распространения рентгеновского излучения и распределения его электромагнитного поля внутри многослойной наноструктуры учитывает эффект рефракции за счет наличия второй производной по глубине структуры [1]. Разработан численный метод решения полученной задачи и дан анализ результатов вычислительных экспериментов. Для решения обратной задачи с целью определения различных параметров наноструктуры по имеющемуся угловому спектру интенсивности отраженного рентгеновского излучения предлагается использовать аппроксимационно-комбинаторный метод декомпозиции и композиции систем.

1. Хачатуров Р.В. Прямая и обратная задачи определения параметров многослойных наноструктур по угловому спектру интенсивности отраженного рентгеновского излучения. ЖВМ, 2009, том 49, № 10, с. 1860–1867.

Хачатуров Рубен Владимирович, к.ф.-м.н., с.н.с
129085, Москва, Пр.Мира, д.81
Тел.: 8(916)9785519; E-mail: rv_khach@yahoo.ie

ИЗМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЕНОК ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

С.В. Хлыбов¹⁾, В.Б.Зайцев¹⁾, Н.Л. Левшин¹⁾, С.Г. Юдин²⁾

¹⁾Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва.

²⁾Институт кристаллографии Российской Академии Наук, Москва.

При переходе от «объемных» слоев жидких кристаллов к сверхтонким ленгмюровским пленкам следует ожидать изменение свойств этих веществ. Такое изменение может быть связано в первую очередь с уменьшением подвижности молекул жидкого кристалла в ленгмюровской пленке. В качестве объекта был выбран паратетрадецилоксибензилиденамино-2-метилбутилцианоцинномата (ТДОБАМБЦЦ). Пленки получали методом Ленгмюра-Шефера. Для адсорбционных и электрофизических измерений использовались пленки толщиной в 10 монослоев, для оптических - 30 монослоев. С помощью адсорбционных измерений по разработанной нами ранее методике [1] был обнаружен структурный фазовый переход при 75°C. Далее исследовались поляризация отраженного света и спектр диффузного отражения от поверхности пленок при различных температурах. Температурные зависимости интенсивности диффузно отраженного на разных длинах волн света имеют сходный характер – в области температур от 60 до 90°C наблюдается резкое падение интенсивности света с минимумом температуры при ~70°C. Степень поляризации света, отраженного от ленгмюровской пленки достигала максимума также вблизи температуры 70°C. Было проведено изучение температурной зависимости электроемкости пленки ТДОБАМБЦЦ. Емкость имела широкий максимум в интервале температур 70-110°C. Максимальное значение емкости наблюдалось при 80°C. При высоких температурах ($t > 110^\circ\text{C}$) было зарегистрировано резкое снижение электроемкости. Таким образом, в настоящей работе с помощью адсорбционных измерений был обнаружен структурный фазовый переход. Оптическими и электрофизическими методами были зарегистрированы аномалии интенсивности и поляризации отраженного света, а также электроемкости в том же диапазоне температур. Анализ полученных данных позволяет утверждать, что наблюдается сегнетоэлектрический фазовый переход.

1. Н.Л. Левшин, С.А. Пестова, С.Г. Юдин. Коллоидный журнал, **63**, 205 (2001)

Хлыбов Сергей Владимирович

119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Тел.: (495)9391792; E-mail: khlybov_serгей@mail.ru

РОЛЬ МЕЖФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ В ФОРМИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ СТРУКТУРЫ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

А.М.Шикин, В.К.Адамчук

Санкт-Петербургский государственный университет, С.- Петербурга

Уменьшение размеров синтезируемых и используемых в современной наноэлектронике и спинтронике систем ведет к тому, что межфазовая граница и эффекты на межфазовой границе играют все более определяющую роль в формировании электронной структуры низкоразмерных систем самого разнообразного типа. Влияние межфазовой границы может приводить как к модификации электронной структуры посредством гибридизации с электронными состояниями подложки, на которой данные квантовые объекты формируются, так и к индуцированной подложкой спиновой поляризации электронных состояний, приводя к формированию новых свойств, не характерных для объема.

В докладе будут представлены и обсуждены особенности электронной структуры различного типа низкоразмерных систем, зависимость электронной структуры подобного типа систем от их размеров, показана возможность индуцированной подложкой спиновой поляризации электронных состояний за счет эффектов спин-орбитального и обменного взаимодействий, будет проанализирована роль межфазовой границы в формировании электронной и спиновой структуры формируемых низкоразмерных систем, а также роль спин-зависимых эффектов «непересечения» электронных состояний на межфазовой границе. Анализ будет производиться на примере низкоразмерных слоистых систем на основе графена, а также металлов с различной структурой валентной зоны и различным атомным номером. Будут представлены результаты, показывающие возможность аномально высокого индуцированного подложкой спин-орбитального расщепления электронных состояний графена и проанализированы причины и основные факторы, определяющие данные эффекты.

Шикин Александр Михайлович, профессор
198 504, С.-Петербург, ул.Ульяновская, д.1
Тел.: 8(812)4284367; Факс: 8(812)4287240; E-mail: ashikin@inbox.ru

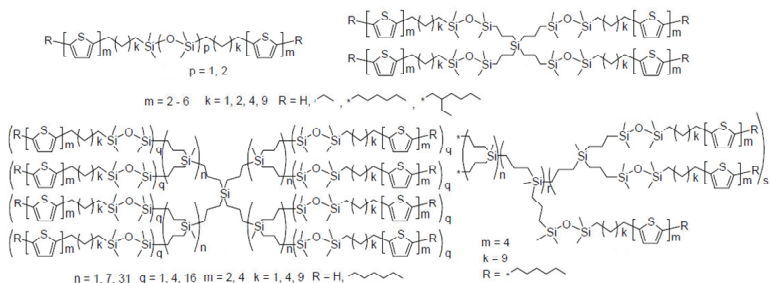
СТРУКТУРА МОНОДЕНДРОНОВ И ДЕНДРИМЕРОВ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ α, α' ДИАЛКИЛОЛИГОТИОФЕНОВ

М.А.Щербина^{1,2)}, А.В.Бакиров^{1,2)}, С.А. Пономаренко²⁾, С.Н.Чвалун^{1,2)}

1) *Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва*

2) *Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва*

Макромолекулы различного химического строения и топологии на основе тиофена представляют большой интерес благодаря уникальным оптическим и электрическим свойствам, открывающим широкие возможности их использования в качестве функциональных материалов для создания новых органических оптоэлектронных устройств: светоизлучающих и информационных дисплеев, солнечных батарей, лазеров, сенсоров. В работе разработана новая концепция молекулярного дизайна растворимых органических полупроводниковых материалов.



Изучение фазового поведения 4Т-содержащих дендримеров методами ДСК, мало- и большеуглового рентгеновского рассеяния и ПОМ показало высокую кристалличность данных материалов, которая уменьшается с возрастанием номера генерации из-за разрушения упорядочения 4Т-фрагментов, вызванное увеличением объема дендритного ядра. Так, температуры и энтальпии плавления, практически равные для дендримеров низких генераций G0 и G1, существенно уменьшаются с увеличением номера генерации для более высоких генераций дендримеров G3 и G5, и при этом существенно расширяется интервал плавления. Таким образом, увеличения локальной плотности олиготиофеновых групп посредством присоединения их к разветвленному ядру является практически полезным только для низких генераций дендримеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 11-03-00669) и совета по грантам президента Российской Федерации (МК-4006.2010.3)

Щербина Максим Анатольевич, к.ф.-м.н., в.н.с.
123098, Москва, пл.Курчатова, д.1
Тел.: 8(916)7879995; E-mail: shcherbina@ispm.ru

СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН ОТ МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМ

С.Н. Якунин¹⁾, М.А. Чуев²⁾, И.А. Субботин¹⁾, А.Ю. Серёгин^{1,3)}, Э.М. Пашаев¹⁾, И.А. Махоткина⁴⁾³⁾, И.А. Лихачёв¹⁾, М.В. Ковальчук^{1,3)}, В.В. Квардаков¹⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва;

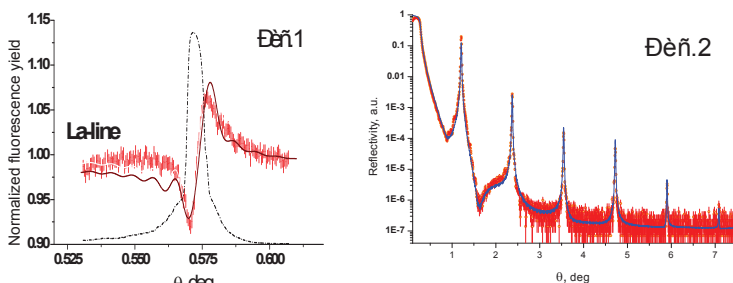
²⁾ Физико-технологический институт РАН, Москва;

³⁾ Институт кристаллографии РАН, Москва;

⁴⁾ FOM Institute for Plasma Physics Rijnhuizen, Nieuwegein, The Netherlands

Разработан новый методический подход для восстановления профилей концентрации атомов по глубине многослойной структуры из угловых зависимостей выхода соответствующего флуоресцентного излучения в окрестности дифракционного пика.

Данный подход был опробован на модельной короткопериодичной многослойной системе La/B₄C приготовленной методом магнетронного напыления. Угловые зависимости выхода флуоресцентного излучения (рис.1) измерялись на станции “Ленгмюр” Курчатовского центра синхротронного излучения, данные рентгеновской рефлектометрии (рис.2) получены в институте FOM Rijnhuizen. Используя новый подход для анализа экспериментальных данных, был получен профиль распределения лантана по глубине структуры, а так же определены структурные параметры многослойных систем, получены профили электронной плотности, толщины основных и интерфейсных слоев, реальные значения оптических констант материалов.



Сергей Николаевич Якунин, с.н.с.
123182, пл. Академика Курчатова, д. 1.
Тел.: 8(499)1967393; E-mail: sny@crys.ras.ru

СЕКЦИЯ II

Поверхности и слоистые наносистемы

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ InN И GaN НА ПОДЛОЖКЕ $\text{Si}(111)$

К.К. Абгарян¹⁾, Д.И.Бажанов²⁾, И.В.Мутигуллин¹⁾

¹⁾ Учреждение Российской Академии наук Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва

²⁾ Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Использование предсказательного компьютерного моделирования в сочетании с применением качественно новых технологий изготовления нанопленочных структур и покрытий позволяет выращивать в лабораторных условиях смоделированные ранее наноструктуры с заданными параметрами и прогнозируемыми свойствами.

В данной работе для определения кристаллической структуры и электронных свойств полупроводниковых пленочных наноструктур InN/Si , GaN/Si использовались методы мультимасштабного компьютерного моделирования. При таком подходе расчеты на каждом уровне масштаба проводятся с использованием соответствующих вычислительных моделей, методов и приближений. Результаты моделирования атомной структуры, изучение и анализ ее электронных свойств, для рассматриваемых систем низкой размерности (атомные монослои и кластеры) использовались в качестве входных данных для прогнозирования свойств более сложных систем - многослойных наноструктур с толщиной отдельных слоев в несколько нанометров.

В работе с помощью расчетов из первых принципов в рамках теории функционала плотности было проведено моделирование когерентных интерфейсов $\text{InN}(0001)/\text{Si}(111)$ и $\text{GaN}(0001)/\text{Si}(111)$ с периодом поверхностной решетки, соответствующим кремнию. Изменение периода кристаллической решетки полупроводникового соединения, связанное с рассогласованием решеток подложки и нитридного слоя на гетерогранице, может приводить к изменению электронных свойств полупроводника. В этой связи, с помощью компьютерного моделирования было изучено влияния изменения величины параметра поверхностной ячейки на ширину запрещенной зоны InN и GaN . Были рассчитаны электронные свойства указанных полупроводников для различных значений параметров поверхностной кристаллической ячейки. Результаты расчетов продемонстрировали сильное влияние геометрии пленки полупроводника на ширину ее запрещенной зоны. Полученные данные согласуются с результатами экспериментов.

Абгарян Каринэ Карленовна

119333, Москва, ул.Вавилова, д.40

Тел.: 8(499)1352489; Факс: 8(499)1356159; E-mail: kristal83@mail.ru

ВЛИЯНИЕ АТОМОВ Ge НА ФОРМИРОВАНИЕ ПЛЕНОК $TiGaTe_2$

Э.Ш. Алекперов, А.К. Шарифова, А. Ч. Мамедова, Д.И. Исмаилов

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

В настоящей работе изучены возможности существования той или иной фазы $TiGa_{1-x}Ge_xTe_2$ ($0,02 < x < 0,05$) в зависимости от условий получения пленок.

Осаждение термически испаренного $TiGa_{0,97}Ge_{0,03}Te_2$ на подогретые до 375K подложки приводит к образованию поликристаллической пленки. На электронограммах, полученных от пленок, образующихся на подложках KCl с температурой $T_n=413K$ с последующей выдержкой этой температуры в пределах 10 минут, проявляется текстурированность с двумя взаимно перпендикулярными направлениями. Но в данном случае не удается определить индексы осей зон, попадающих в отражающие положения, что достигается обычно путем наклона образца $\varphi=30^\circ-60^\circ$ до появления новой сетки рефлексов, отвечающих другой зоне. С увеличением температуры подложек до $T_n=433K$ образуются монокристаллические пленки с преимущественной ориентацией кристалликов. Наиболее совершенные эпитаксиальные пленки образуются на монокристаллах KCl, подогретых до $T_n=453K$. Наборы рефлексов, наблюдаемые на электронограммах от монокристаллических слоев, индицируются в тетрагональной сингонии с параметрами элементарных ячеек подтверждающие образование сверхструктурной фазы состава $TiGa_{1-x}Ge_xTe_2$ которые обладает удвоенными периодами по отношению соединений $TiGaTe_2$ (a_0 и c_0): $a=2a_0=1,754nm$; $c=2c_0=1,432nm$, пространственная группа $I4_1/amd$.

Алекперов Эльдар Шахсуварович, доцент
Аз - 1143, Баку, пр.Г.Джавида, д.33
Тел.: 994(12)4395140; Факс: 994(12)4470456; E-mail: aeldar@hotmail.com

СТРУКТУРА ХИРАЛЬНОГО ТРИФЕНИЛЕНА В ОБЪЕМНОМ И ПЛЕНОЧНОМ СОСТОЯНИИ

А.И. Александров, Д.В.Барахтенко, Т.В.Пашкова, О.Б.Акопова

Ивановский государственный университет, Иваново

Представляемая работа содержит результаты исследований объемных образцов, плавающих на воде слоев и тонких плёнок на основе хирального трифенилена.

Объемные образцы трифенилена исследовались методом рентгеновского рассеяния в диапазоне температур от -10 до $+190^{\circ}\text{C}$. Для кристаллической фазы определены симметрия, параметры решетки и упаковка молекул, при выводе которой учитывались стерические факторы, диполь-дипольное взаимодействие и возможность образования водородных связей. Особенностью структуры этой фазы является парная антипараллельная упаковка молекул по отношению к хиральному фрагменту. Последующая жидкокристаллическая фаза имеет колончатую наклонную структуру, но упаковка колонн в сечении образует сетку с существенными трансляционными нарушениями. Выявлено наличие фазового перехода внутри оптически изотропной фазы, связанного, по-видимому, с разрушением парной упаковки, сохранившейся при переходе в изотропную фазу.

Формирование плавающих слоев и плёнок на их основе проводилось с использованием технологии Ленгмюра-Блоджет (ЛБ). При сжатии плавающий слой проходит ряд фазовых состояний, оставаясь при этом монослоем. Особенностью поведения монослоя при декомпрессии является повторение фазовых превращений в обратном порядке и нерегулярный сдвиг относительно друг друга параметров фазовых переходов. Структура ЛБ пленок, сформированных из слоев, находящихся в различных фазовых состояниях, исследовалась с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Сопоставление АСМ и рентгеновских данных свидетельствует о том, что в структуре плёнок присутствует парная упаковка молекул, но сдвиг молекул относительно друг друга происходит по плоским контактам, а не вдоль ребер как в кристаллической фазе объемного образца.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-08-00335).

Александров Анатолий Иванович
153025, Иваново, ул. Ермака, 39, Ивановский государственный университет
Тел.: (4932)371252; Факс: (4932)371252; E-mail: alan@ivanovo.ac.ru

ВЛИЯНИЕ УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА КИНЕТИКУ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ СИНТЕЗЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СЛОЕВ PbS

Т.А. Алексеева^{1,2)}, Н.А. Третьякова^{1,2)}

¹⁾ ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург

²⁾ ГОУ ВПО «Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС России», Екатеринбург

В настоящей работе было исследовано влияние площади межфазной поверхности водного раствора нитрата свинца и воздуха на кинетику осаждения пленок PbS из реакционной смеси, содержащей, кроме соли свинца, тиомочевину, щелочь и сульфит натрия.

Изучение кинетических особенностей образования сульфида свинца в плюмбитной системе. Изучение воздействия предварительного выдерживания водного раствора нитрата свинца, входящего в состав реакционной смеси в лабораторных сосудах разной формы, заключалось в оценке влияния площади межфазной поверхности на кинетику осаждения. Площадь его контакта с воздухом изменялась от 70 до 2 кв. см, что соответствует уменьшению удельной поверхности с $3.5 \text{ см}^2/\text{м}^3$ до $0.1 \text{ см}^2/\text{см}^3$. Экспериментальные данные показали, что с ростом удельной поверхности водного раствора нитрата свинца, используемого для синтеза PbS, наблюдается увеличение протекания скорости реакции от $4 \cdot 10^{-3}$ до $7 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Предварительное помещение водного раствора соли свинца в сосуды различной формы оказывает значительное влияние на состав и распределение гидратированных форм свинца.

Необходимо учитывать размер удельной поверхности и время контакта с воздухом раствора соли свинца при гидрохимическом синтезе сульфидов металлов. Данные исследования позволяют полагать, что наблюдаемые различия непосредственно скажутся на зародышеобразовании, формировании и свойствах пленок PbS.

Алексеева Татьяна Анатольевна, доцент
620002, Екатеринбург, ул.Мира, 19
Тел.: (343)3754445; E-mail: tat-alekseeva@mail.ru

СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛБ-ПЛЕНОК ДИФАЛОЦИАНИНА ОЛОВА

А.В. Алпатова, Р.В. Гайнутдинов, С.Г. Юдин, В.В. Лазарев, С.П. Палто
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

В данной работе продолжено изучение структуры поверхности и диэлектрических свойств ЛБ-пленок дифталоцианина олова (Pc_2Sn). Проведено сопоставление результатов компьютерного моделирования с изотермами сжатия и растяжения пленок на поверхности воды, а так же с данными атомно-силовой микроскопии.

Диэлектрические свойства пленок исследовались методами Штарк-спектроскопии и методом Мерца. Образец имел вид сэндвичевой структуры Al электрод – ЛБ-пленка – Al электрод. ЛБ-пленка состояла из 37 последовательно перенесенных монослоев Pc_2Sn . В пленках был обнаружен как пироэлектрический эффект, так и переключение поляризации. На рис.1 показаны петли гистерезиса поляризации для ЛБ-пленки Pc_2Sn , полученные интегрированием временной зависимости токового отклика. Обращает на себя внимание малая величина коэрцитивного напряжения, составляющего 1-1,5 В. Эффективная переключаемая поляризация пленок достигает величин $\sim 100-200$ нКл/см².

Обсуждается природа пироотклика и нелинейности диэлектрического отклика пленок, что может быть связано как с собственной полярностью молекул дифталоцианина олова, так и с инжекцией зарядов и их градиентным распределением по толщине пленки. Для объяснения природы макроскопической поляризации было проведено сравнение переключения поляризации в пленке Pc_2Sn и сегнетоэлектрическом сополимере ПВДФ/ТрФЭ с учетом данных АСМ.

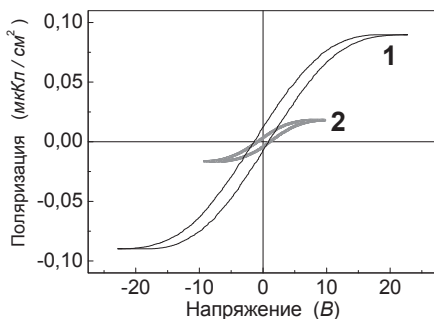


Рис.1. Петли гистерезиса поляризации в ЛБ-пленке Pc_2Sn (37 слоев), измеренные методом Мерца на частоте 1 кГц. Прикладываемое напряжение треугольной формы с амплитудой 23 В (1) и 10 В (2).

Алпатова Анна Викторовна
123423, Москва, ул. Мневники, д.13
Тел.: 8(499)1917953, 8(926)3253754; E-mail: annalpatova@bk.ru

СИНХРОТРОННЫЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ БРОМИДА ИНДИЯ

Д.В. Анисимов, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Бромид индия относится к группе соединений III-VI [1]. Он кристаллизуется в слоистой орторомбической структуре типа TII (пространственная группа D^{17}_{2h}). Слои перпендикулярны оси **b**, а в плоскости слоев находятся две другие оптические оси - **a** и **c**. Энергия запрещенной зоны E_{gd} около 2.0 эВ. С использованием синхротронного излучения при 4.2 К в работе [2] измерены спектры отражения монокристаллов InBr в области энергии 2-30 эВ для поляризаций E_{IIc} и E_{IIa} .

Общепринято, что наиболее полную информацию об электронном строении кристаллов содержат спектры обширного комплекса оптических фундаментальных функций: ϵ_2 , ϵ_1 , k , n , σ , R , α , $E^2\epsilon_2$, $-\text{Im}\epsilon^{-1}$, $-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1}$, $n_{\text{eff}}(E)$, ϵ_{eff} [3]. Они определяются на основе экспериментальных спектров отражения с помощью компьютерных программ, разработанных с использованием интегральных соотношений Крамерса-Кронига.

На основе спектров $R(E)$ кристалла InBr [2] были рассчитаны поляризованные спектры всех остальных оптических функций в области 0-30 эВ. Определены энергия максимумов многочисленных сильно поляризованных структур $R(E)$, $\epsilon_2(E)$, $\epsilon_1(E)$, и остальных функций. Установлены их основные особенности. Коэффициент поглощения достигает значений $\sim 2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$. Эффективное количество валентных электронов $n_{\text{eff}}(E)$ участвующих в переходах равно ~ 32 ($E \approx 30$ эВ), $n(E)$ равно около единицы в области энергий $E > 12$ эВ, что свидетельствует о корректности выполненных расчетов.

1. Соболев В.В. Зоны и экситоны галогенидов металлов. (Кишинев: Штиинца). 284 с. (1987).

2. Nakamura K., Sasaki Y., Wanabe M., Fujita M. Physica Scripta. 35, 557 (1987).

3. Соболев В.В., Неможкаленко В.В. Электронная структура полупроводников. (Киев: Наук. думка) 432 с. (1988).

Анисимов Денис Валерьевич

426034, Ижевск, ул. Университетская, д.1

Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУРАХ

Арутюнян В.В.¹⁾, Акопян Н.А.²⁾, Атоян В. А.³⁾, К. И. Пискулян³⁾, Оганесян А. В.⁴⁾

¹⁾ *Национальная Научная Лаборатория им А.И. Алиханяна, Ереван, Армения*

²⁾ *Ереванский Государственный Университет, Ереван, Армения*

³⁾ *Армянская Атомная Электростанция, Мецамор, Армения*

⁴⁾ *Государственный Комитет Ядерной Безопасности, Ереван, Армения,*

С точки зрения радиоактивного загрязнения среды, работающими в штатном режиме АЭС, первостепенный интерес представляют сорбенты- (фильтры)) на основе модифицированных – (химически обработанных растворами кислот) супертонких базальтовых волокон, способствующих повышению сорбционной емкости по активным газам и радионуклидам, и используемых в системах газо-аэрозольной очистки ядерных реакторов на атомных станциях, в химической промышленности, для очистки технологических газов и радиоактивных аэрозолей. Обработка базальтового супертонкого волокна (БСТВ) в растворах химических кислот (соляной и серной) с различными концентрациями может привести к изменению поверхностного состояния и, следовательно, его многих физических свойств. Исследования влияния такой обработки важны, поскольку они могут менять его адсорбционные свойства при использовании БСТВ в качестве адсорбента и, следовательно, найти оптимальные параметры для изготовления фильтров на основе этого материала.

Для обеспечения радиационной безопасности окружающей среды в районе Армянской АЭС, проведены эксперименты по улавливанию (захвату) радиоактивных аэрозолей, взвешенных в воздухе, фильтрами, в которых использованы супертонкие базальтовые волокна размерами 1-3мкм. Фильтры, представляют собой макропористую среду с очень сложными геометрическими характеристиками. В связи с этим особую ценность и актуальность приобретает моделирование процесса фильтрации, зависящее как от размеров радиоактивных частиц, так и от поверхностных структурных особенностей базальтовых волокон. Оценки показали, что наличие электрического заряда на супертонких волокнах приводит к тому, что двигающиеся в потоке взвешенные частицы поляризуются и сильнее притягиваются к модифицированной поверхности волокна. Результаты исследований показали, что процесс осаждения радиоактивных аэрозолей характеризуется высоким коэффициентом захвата, в химически модифицированных супертонких базальтовых волокнах который зависит от условий течения газа и от размеров частиц.

Арутюнян Вачаган Викторович, доктор физ-мат наук, рук. отдела прикладной физики
375036, ул. братьев Алиханян, дом 2, Ереван, Армения
Тел: +374 10 34-44-88; Факс: +374 10 34-47-36; E-mail: vharut@mail.yerphi.am

ИЗУЧЕНИЕ Pd/MOFs КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ МЕТОДОМ XAS

Е. В. Афонина¹⁾, В.И. Исаева¹⁾, О.П. Ткаченко¹⁾, В. Грюнерт²⁾, Л.М. Кустов¹⁾

¹⁾ *Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Москва*

²⁾ *Рур-Университет, Бохум, Германия*

Синтезированы образцы металлоорганических координационных полимеров (MOCPs) MOF-5 ($Zn_4O(bdc)_3$, bdc = бензол-1,4-дикарбоксилат), IRMOF-3 ($Zn_4O(abdc)_3$, abdc = 2-амино-бензол-1,4-дикарбоксилат) и $[Zn(DMF)_2(2,5-Pzdc)]$, (DMF = диметилформамид, Pzdc = пиразин-2,5-дикарбоксилат). Нанесение Pd осуществляли пропиткой по влагеёмкости с последующим термическим восстановлением (150°C, 4 ч, вакуум). Pd/MOCPs использовали в качестве катализаторов жидкофазного гидрирования бутин-2-диола-1,4 в *цис*-бутен-2-диол-1,4 (метанол, 1 атм H_2 , 20°C).

Регистрацию спектров XAS проводили в центре синхротронного излучения DESY в Гамбурге (Германия, проект II-2007/0022). Спектры регистрировали в режиме пропускания при температуре жидкого азота. Энергетическое положение *K*-края поглощения Pd в спектрах XANES Pd/MOCPs и Pd-фольги совпадает, однако сравнение EXAFS спектров показало, что интенсивность осцилляций в спектрах катализаторов намного меньше и зависит от носителя.

В EXAFS спектрах всех образцов присутствует пик на расстоянии около 1.5 Å. Этот пик находится на таком же расстоянии, как и в спектре оксида палладия и отражает атомную пару Pd–O и/или Pd–C. Второй пик на расстоянии около 2.5 Å отражает атомную пару Pd–Pd. Исходя из предположения сферической формы, можно рассчитать формальный размер металлических частиц палладия. Расчет показывает, что на поверхности MOFs в процессе восстановления формируются наночастицы с размерами около 1 нм.

Установлена корреляция между каталитической активностью Pd/MOCPs и средним размером частиц Pd.

Афонина Елена Владимировна, аспирантка
119333, Москва, Ленинский проспект, д.47

Тел.: 8(499)1358991; Факс: 8(499)1355328; E-mail: AfoninaEV.msu@gmail.com

ВОЗМОЖНОСТЬ ПОЛУЧЕНИЯ СТАБИЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ, ПРИМЕНЯЕМЫХ В ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИИ, ПРИ ОБРАБОТКЕ МЕТОДОМ ПЕРИОДИЧЕСКОГО РАЗРЯДА В ПОТОКЕ ЖИДКОСТИ

Е.Р.Ахметова, Р.Г.Тазетдинов

Московский авиационный институт (Государственный технический университет), Москва

Работа делается в развитие гранта Минобразования РФ «Исследование и разработка принципиальной технологии повышения износостойкости и трибологических характеристик материалов для эндогенного протезирования посредством воздействия мощных ионно-плазменных потоков». УДК 621.039.8, № госрегистрации 306449.

В работе проведен анализ металлических материалов, применяемых в эндопротезировании и могущих использоваться в парах трения, с позиции критериев биосовместимости, проанализировано воздействие периодического разряда в потоке жидкости (ПРПЖ) на материалы, исследовано влияние ПРПЖ на изменение трибомеханических характеристик титановых сплавов, исследована структура поверхности титановых сплавов при обработке периодическим разрядом в потоке жидкости при различных параметрах обработки, по имеющимся математическим моделям проведены расчеты, показывающие возможность получения наноструктурных композиций на поверхности титановых сплавов при обработке ПРПЖ, обобщены полученные ранее результаты.

Ахметова Елена Равильевна, ст.преподаватель
125993, Москва, Волоколамское ш., д.4
Тел.: 8(499)1584732; 8(903)1763967; E-mail: e_akhmetova@mail.ru

СТРУКТУРА И СОСТАВ СЭНДВИЧ-СТРУКТУР (SnSe–PbSe)_n

В.М.Баканов¹⁾, Л.Н.Маскаева²⁾, Х.Н.Мухамедзянов¹⁾, В.Ф.Марков¹⁾

¹⁾ *Уральский федеральный университет имени Б.Н.Ельцина,
Екатеринбург*

²⁾ *Уральский институт ГПС МЧС России, Екатеринбург*

Свежеосажденные из водных сред сэндвич-структуры (SnSe–PbSe)_n, $n = 1-4$ не обладают фоточувствительными свойствами. В качестве технологической операции для обеспечения фоточувствительности слоев использовалось термическое окисление как на открытом воздухе, так и в условиях ограничения поступления к образцам кислорода воздуха.

При анализе рентгенограмм сэндвич-структур (SnSe–PbSe)_n после отжига наряду с рефлексами кубической структуры $B1$ обнаружены линии, относящиеся к соединениям PbO, PbSeO₃, 4PbO·PbSeO₃, ответственные за фоточувствительность. С увеличением температуры обработки сэндвич-структур, имеет место эволюционный характер изменения их состава и микроструктуры, зависящий от количества кислородсодержащих фаз.

Формируемые сэндвич-структуры наноструктурированы (диаметр кристаллитов ~30 нм). Термоокисление увеличивает размер кристаллитов за счет процесса рекристаллизации до 200-210 нм и приводит к формированию твердых растворов Sn_xPb_{1-x}Se, состав которых зависит от числа слоев в сэндвич-структуре.

С увеличением числа слоев и, следовательно, толщины сэндвич-структур содержание SnSe в твердом растворе увеличивается для шести- и восьмислойных композиций. Максимально достигнутое значение составило 12,7 мол.%. Таким образом, впервые химическим осаждением получены твердые растворы в системе PbSe–SnSe с таким высоким содержанием олова.

Баканов Василий Михайлович, аспирант
624250, г. Заречный, ул. Ленинградская, д. 15, кв. 83
Тел.: 8(919)3907592; E-mail: Bakanov-EVO@mail.ru

ВЛИЯНИЕ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ ПОРИСТЫХ БРЭГГОВСКИХ СТРУКТУРАХ Si (111) НА ИХ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

В.А. Балин¹⁾, А.Л. Васильев²⁾, Б. В. Набатов²⁾, М.А. Чув¹⁾, А.А. Ломов¹⁾

¹⁾Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

²⁾Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Одним из успешных способов модификации свойств приповерхностных слоев кремниевых подложек является процесс электрохимического травления в режиме анодирования. Методика позволяет формировать 3D-многослойные системы, сверхрешетки и брэгговские зеркала, у которых периодически меняется диэлектрическая проницаемость на длине волны оптического диапазона. Настоящая работа посвящена исследованию влияния условий анодирования на структуру и оптические свойства пористых брэгговских зеркал (ПБЗ), сформированных на подложках

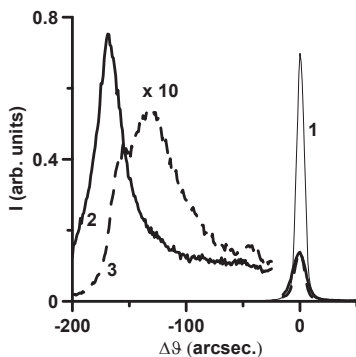


Рис. Экспериментальные КДО от исходной подложки Si (1), однородного (2) и релаксированного (3) ПБЗ с периодом 0.5 и 0.24 мкм соответственно. 111 отражение, медное излучение.

Si(111) (Sb) ($\rho=0.01$ ом см).

ПБЗ с числом пар слоев от 80 до 110 формировались в растворе $C_2H_5OH:HF = 1:2$ при периодическом ступенчатом изменении тока от 25ма до 10ма. Структурная характеристика полученных образцов была проведена методами кривых дифракционного отражения (КДО) (рис.) и РЭМ. Угловая зависимость спектров отражения регистрировались на спектрофотометре Cary-5000.

Определены толщина, деформация, однородность и средняя пористость ПБЗ. Показано, что сформированные пористые периодические структуры имеют средний показатель

преломления 1.55 и являются спектрально чувствительными в диапазоне 0,6-0.7 мкм. Обсуждаются проблемы влияния расслаивания ПБЗ при релаксации напряжений на их оптические свойства.

Авторы выражают благодарность В.А. Караванскому за предоставление образцов для исследований. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ.

Балин Василий Андреевич, инженер
117282, Москва, Нахимовский просп., 36/1
Тел.: 8(499)1296810; Факс: 8(499)1296810; E-mail: vasily.balin@gmail.com

МАГНИТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ МОНОСЛОИ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА

Д.В.Барахтенко, А.И.Александров, Т.В.Пашкова, М.С.Груздев

Ивановский государственный университет, Иваново

Представляемая работа содержит результаты исследований плавающих на воде слоёв на основе комплексов железа: K1 со структурой $[\text{Fe}(\text{L})\text{X}(\text{H}_2\text{O})_2]^+\text{X}(\text{PF}_6)^-$ с лигандом на основе азометина и K2 – $[\text{Fe}(\text{L})_2]^+\text{X}(\text{PF}_6)^-$ с бензопиридиновыми лигандами.

Формирование плавающих слоев проводилось с использованием установки Ленгмюра-Блоджет (ЛБ), снабженной приставкой, позволяющей формировать слои в присутствии магнитного поля с индукцией 0,05 Тл. Комплексы наносились на поверхность воды из раствора в хлороформе с концентрацией 0,3 г/мл с коэффициентом покрытия не превышающем 0,5. При анализе зависимостей поверхностного давления от площади, приходящейся на молекулу (РА изотерм) использовалось и их представление в координатах Фольмера ($\text{PA}=\text{f}(\text{P})$).

Анализ изотерм прямого и обратного хода показал, что при формировании плавающих слоёв на основе и комплекса K1 и комплекса K2 происходит образование молекулярных агрегатов, которые не распадаются при декомпрессии. При сжатии в диапазоне давлений 0-30 мН/м плавающие слои проходят ряд фазовых состояний, оставаясь при этом монослоями. Особенностью поведения двухлигандного комплекса K2 является изменение его конформации (излом) при сжатии из-за выталкивания хвостов лигандов с поверхности воды, чего не наблюдается у монолигандного комплекса K1.

При формировании монослоёв в присутствии магнитного поля изотермы комплексов ведут себя по-разному. В случае K2 происходит сдвиг изотермы в сторону меньших площадей (уплотнение монослоя), хотя наблюдающийся эффект меньше, чем в случае комплексов лантаноидов [1]. В случае K1 наблюдается аномальный эффект - сдвиг изотермы в сторону больших площадей на молекулу (образование более рыхлого слоя), что требует дальнейшего изучения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-08-00335).

1. Alexandrov A.I., Krasnov A.V., Pashkova T.V. // Syn.Met. 2004.Vol.147. No 1-3. P.205-208

Барахтенко Дмитрий Вениаминович

153025 Иваново, ул. Ермака, 39, Ивановский государственный университет
Тел.: (4932)371252; Факс: (4932)371252; E-mail: bardmitr@yandex.ru

ОСОБЕННОСТИ ИМПУЛЬСНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОВОЛОКНАХ ПО ДАННЫМ АННИГИЛЯЦИИ ПОЗИТРОНОВ

И.И. Бардышев, А.Д. Мокрушин, В.А. Котенев, А.Ю.Цивадзе

Учреждение Российской академии наук Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН, Москва

В данной работе использован высокочувствительный ядерно-физический метод, основанный на измерении характеристик аннигиляции валентных электронов с инжектируемыми в исследуемое вещество позитронов. Проведено исследование углеродных нановолокон в сравнении с поликристаллическим графитом методом измерения кривых угловой корреляции аннигиляционного излучения $S(\Theta)$ в модификации 1D - геометрии. Для исследованных материалов получены распределения по импульсам валентных электронов:

$$\Theta = p/mc; \rho(p) = \Theta^{-1} dC(\Theta)/d\Theta; N(p) = 4\pi p^2 \rho(p); \rho(p) = \left| \int \psi(r) \psi_+(r) e^{-ikr} dr \right|^2; k = 2\pi p/h.$$

Форма кривой $S(\Theta)$ определяется волновой функцией аннигилирующих электронов.

Исследованы порошкообразные образцы углеродных нановолокон, как исходные, так и поверхностно-модифицированные окислением в азотной кислоте при 150°C (в автоклаве), либо отжигом в вакууме при 700°C. Исходные образцы представляют собой волокна диаметром 40–60 нм (без внутреннего канала). Обнаружено, что импульсные распределения $N(p)$ для углеродных нановолокон существенно отличаются такового для графита. При совпадении по форме в области малых импульсов $p \leq 5$ (в единицах $10^{-3} mc$) и одинаковом положении максимумов $p=6$ наблюдается существенное различие в области импульсов $p > 9$, выражающееся в превышении $N(p)$ для углеродных нановолокон по сравнению с графитом.

Наблюдаемое различие $N(p)$ в углеродных нановолокнах по сравнению с графитом однозначно указывает на увеличение среднего импульса аннигилирующих электронов, что, в свою очередь, связано с увеличением степени локализации электронов (в соответствии с принципом неопределенности $\Delta x \Delta p \sim \hbar$). Это можно объяснить искривлением графитоподобных плоскостей в нановолокнах.

Бардышев Иван Иванович
119991 Москва, Ленинский просп., 31, корп.4
Тел.: (495)9554467; E-mail: bardyshev@phyc.che.ac.ru

ПОСЛОЙНЫЙ АНАЛИЗ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИИ ОТРАЖЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

А.А.Батраков, В.П.Афанасьев, А.В.Лубенченко, И.А.Костановский

Кафедра общей физики и ядерного синтеза МЭИ (ТУ), Москва

Детектирование водорода и его изотопов в материалах традиционно выполнялось методом быстрых атомов отдачи [1] или методом ядерных реакций [2]. В настоящей работе предлагается метод анализа водорода в конструкционных материалах реакторов, основанный на расшифровке энергетических спектров электронов, отраженных от исследуемого образца.

В данной работе измерения энергетических спектров отраженных электронов проводились с помощью модуля электронно-ионной спектроскопии (ЭИС) на базе платформы Нанофаб 25. Модуль ЭИС обладает уникальным энергетическим разрешением равным 0,3 эВ.

Методика получения исследуемых углеводородных покрытий с помощью генератора плазмы с продольным магнитным полем PSI-2 (Max-Planck Institute of Plasma Physics, Germany) представлена в работе [3].

Полученные энергетические спектры отраженных электронов в широком диапазоне потерь энергий, с помощью модуля ЭИС, позволяют реализовать комбинацию спектроскопии отраженных электронов в широком диапазоне потерь энергии и спектроскопии характеристических потерь энергии [4]. Энергетическое разрешение энергоанализатора и параметры электронной пушки позволяют реализовать спектроскопию упругоотраженных электронов.

1. Roth J., Scherzer B.M.U., Blewer R.S., at all J Nucl. Mater. 93-94, 601, 1980.
2. Alimov V.Kh., Roth J.Phys. Scripta 128, 6-13, 2007.
3. Афанасьев В.П., Батраков А.А., Лубенченко А.В. и др. // Вестник МЭИ. 2009. № 4. С. 25-32.
4. Афанасьев В.П. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел. Издательский дом МЭИ, 2005.

Батраков Александр Алексеевич

111250, Москва, Красноказарменная улица, дом 14, Кафедра ОФИАС

Тел.: 8(495)3627304; E-mail: BatrakovAA@mail.ru

ТЕНЗОМЕТРИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ ИЗ АНАЛИЗА ЛИНИЙ КИКУЧИ

М.Д.Борча¹⁾, С.В.Баловсяк¹⁾, Я.Д.Гарабажив¹⁾, И.М.Фодчук¹⁾, В.Н.Ткач²⁾

¹⁾ Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича, Черновцы

²⁾ Институт сверхтвердых материалов им. В.Н.Бакуля НАН Украины, Киев

Упругие искажения, возникающие на границах раздела в многослойных системах и тонких пленках в разных ростовых условиях, влияют на их электрофизические характеристики. Поскольку локальное изображение дифракции электронов на отражение можно записывать от отдельных частей образца размерами в несколько нанометров, то появляется возможность контроля распределения полей деформаций в тонких пленках или на границах раздела в многослойных наноразмерных системах [1-2].

В докладе представлены исследования кристаллов алмаза, текстурированных алмазных пленок, выращенных CVD методом в разных условиях, а также границ раздела многослойных наноразмерных систем $GaAs/Ga_{1-x}In_xAs/GaAs$. Исследования проводились с помощью сканирующего растрового электронного микроскопа фирмы «Zeiss» EVO-50 с использованием CCD-детектора.

Для повышения точности определения изменений параметров решетки методом Кикучи использовано различные способы обработки дифракционной картины, в том числе: корреляционный метод, преобразования Фурье и Хафа. Показано высокую чувствительность распределений интенсивности отраженных электронов в многоволновых областях дифракции (пересечениях линий Кикучи) к слабым структурным изменениям. Построены диаграммы распределения деформаций в локальных областях исследуемых кристаллов и систем.

Определена взаимосвязь между трансформациями распределений интенсивности в двух- и многоволновых областях дифракции электронов со структурным совершенством алмазных пленок и технологическими параметрами их получения. Получены распределения полей деформаций на границах раздела многослойных гетеросистем и построены соответствующие тензора деформаций.

1. М.Д.Борча, С.В.Баловсяк, Я.Д.Гарабажив, В.М.Ткач, И.М.Фодчук // Металлофизика и новейшие технологии. 2009. Т.31, №7. С.52.
2. R.R.Keller, A.Roshko, R.H.Geiss, etc. // Microelectronic Engineering. V.75. N 1. 2004. P. 96.

Борча Марьяна Драгошевна
58012, Украина, Черновцы, Коцюбинского, 2. ЧНУ
Тел.: (38 037 22)44834; E-mail: m_borcha@ukr.net

КИНЕТИКА НАБУХАНИЯ АДГЕЗИВНОГО СЛОЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Л.А. Брусницына^{1),2)}, Т.А. Алексеева^{1),2)}, Е.И. Степановских¹⁾

¹⁾Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург

²⁾Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России, Екатеринбург

Проведено изучение процесса набухания эпоксидно-каучукового адгезивного слоя в диметилформамиде (ДМФА) и диметилсульфоксиде (ДМСО). Сложность процесса набухания обусловлена гетерогенностью адгезивного слоя. Получены кривые набухания. Скорость набухания в начальный момент времени значительно выше в ДМФА, чем в ДМСО.

Механизм набухания эпоксидно-каучукового адгезивного слоя определяется структурой молекул растворителя ДМФА и ДМСО. Активная роль принадлежит атому кислорода и механизм набухания сводится к разрыву углеродных связей смолы и образованию новых эпоксидных групп, что приводит к потере жесткости полимерных молекул основы, увеличению объема образовавшихся пустот, которые заполняются молекулами растворителя, что приводит к смещению фронта набухания вглубь полимера.

Установлено, что для обработки экспериментальных кинетических данных не могут быть использованы классические модели для процессов набухания. Показано, что процесс набухания можно моделировать, как медленную диффузию молекул растворителя в среде адгезивного слоя. Этот процесс описывается уравнением Фика при условии бесконечной диффузии.

Получено уравнение, связывающее увеличение массы образца со временем набухания. Уравнение вполне удовлетворительно описывает экспериментальные данные. Рассчитаны константы набухания адгезивного слоя $K_{\text{наб}}(\text{ДМСО}) = 0,423 \text{ мг}/(\text{см}^2 \text{ мин}^{1/2})$; $K_{\text{наб}}(\text{ДМФА}) = 0,781 \text{ мг}/(\text{см}^2 \text{ мин}^{1/2})$.

Брусницына Людмила Александровна, доцент
620002, Екатеринбург, ул.Мира, 19
Тел.: (343)3754445; E-mail: tat-alekseeva@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОНИТЕЙ GaAs В ПОРИСТОМ Al₂O₃ МЕТОДАМИ EXAFS-СПЕКТРОСКОПИИ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Р.Г. Валеев^{1),2)}, А.Н. Деев¹⁾, В.Ф. Кобзиев²⁾, В.В. Мухгалин¹⁾, В.В. Кривенцов³⁾

¹⁾ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

²⁾ *Удмуртский государственный университет, Ижевск*

³⁾ *Институт катализа им. Борескова СО РАН, Новосибирск*

В последнее время все больший интерес привлекают нанонити арсенида галлия, который является традиционным материалом, используемым в ВЧ-электронике, устройствах генерации, преобразования и детектирования различных видов излучения, в диэлектрических матрицах. Использование матриц позволяет не только избежать переноса заряда между отдельными наноструктурами с помощью пространственного разделения элементов, но и защитить их от внешних воздействий.

Нитевидные наноструктуры GaAs были получены методом термического испарения материала на пористую (диаметр пор ~ 100 нм, расстояние между порами ~ 30 нм) пленку анодного оксида алюминия в условиях сверхвысокого вакуума. В качестве тестового образца использовались пленка GaAs на гладкой поверхности Al₂O₃, полученная в том же цикле напыления, и порошок материала. Стехиометрия образцов была аттестована методом рентгеноэлектронной спектроскопии.

Структура нанонитей была исследована методами рентгеновской дифракции и протяженных тонких структур спектров рентгеновского поглощения (EXAFS-спектроскопия). Показано, что нитевидные наноструктуры имеют более упорядоченные, по сравнению с пленками, кристаллическую и химическую структуры, что выражается в стехиометрии состава, величинах параметров решетки, межатомных расстояний и координационных чисел. Для нитевидных структур они более близки к данным, полученным для порошков GaAs.

Работа выполнена в рамках проектов Программы Президиума РАН по направлению № 21 и № 09-П-2-1026.

Валеев Ришат Галеевич, к.ф.-м.н., ученый секретарь
426000, Ижевск, ул. Кирова, 132.
Тел.: (3412)430262; Факс: (3412)250614; E-mail: rishatvaleev@udm.ru

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМ Mo/Si

Г.А.Вальковский, М.В.Байдакова, П.Н.Брунков, С.Г.Конников, А.А.Ситникова,
М.А.Яговкина, Ю.М.Задиранов

*Учреждение Российской академии наук Физико-технический
институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*

Комплексный подход, основанный на совместном использовании методов просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгеновской дифрактометрии (РД) и рентгеновской рефлектометрии (РР) был применен для исследования многослойных систем Mo/Si, выращенных методом магнетронного распыления. Результаты различных методов хорошо коррелируют и дополняют друг друга.

В результате исследования структур методом ПЭМ было показано существование включений кристаллического Mo, а также определены период и толщины отдельных слоев. Анализ изображений ПЭМ в режиме высокого разрешения выявил присутствие переходных слоев на интерфейсах.

Исследование методом РД подтвердило наличие неоднородности Mo-слоев, проявляющейся в разной степени в различных образцах. Использование моды тонких пленок позволило проследить изменение степени текстуры с глубиной.

В результате моделирования кривых РР были определены детали технологического процесса, заключающиеся в нестабильности процесса напыления. Было подтверждено существование переходных слоев на интерфейсах, формирующихся главным образом за счет Si слоя. Сопоставление результатов РР с данными РД позволило заключить, что вертикальные размеры блоков Mo совпадают с толщинами Mo слоев.

Ожидается, что разработанный подход может быть использован для анализа качества многослойных периодических систем с целью прогнозирования их рабочих характеристик.

Вальковский Глеб Андреевич, аспирант
194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.26
Тел.: 8(812)2927382; Факс: 8(812)2971017; E-mail: xray@mail.ioffe.ru

ИОН-ПЛАЗМЕННЫЙ СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛИЗИРОВАННЫХ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПЛЕНОК

М.А.Ванцян¹⁾, А.В.Паладичева¹⁾, Г.В.Попова¹⁾, А.Р.Коригодский¹⁾, Т.В.Степанова²⁾,
Д.В.Мозгрин²⁾, С.П.Беседин³⁾

¹⁾ *Российский химико-технологический университет им.
Д.И.Менделеева, Москва*

²⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет
«МИФИ», Москва*

³⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский
институт», Москва*

Методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) изучены мультислойные мономолекулярные пленки полиаминокислотных (ПАК) производных циклотрифосфазена (ЦТФ) и сополимеров 3,6-дигидрокси-пиридазина и изофталевой кислоты (поли-3,6-дигидрокси-пиридазилизофталат, ПДПИ) до и после ион-плазменной металлизации медью. Мультислойные пленки, содержащие до 40 монослоев, получали путем переноса монослоев с водной субфазы на кварцевую подложку методом Ленгмюра-Шефера (ЛШ). Установлено, что чистые, ненапыленные пленки имеют гранулированную поверхность. В случае ПАК-производных ЦТФ латеральный размер гранул и их средняя высота составляют 100 нм и 7-8 нм соответственно, для ПДПИ - 50-200 нм и 7-8 нм.

Низкотемпературное ион-плазменное напыление меди в импульсном режиме привело к получению доменной структуры (наподобие «островков») для пленок ПАК-производных ЦТФ. Размер домена по всем трем измерениям - порядка 100 нм, при этом на участке поверхности площадью 1 мкм² на 1-2 «островка» приходится около 30 гранул. В случае пленок ПДПИ формируется нитевидная структура с длиной нити до нескольких мкм и высотой – 20-30 нм. Можно предположить, что структура металлослоя на поверхности мультислойной мономолекулярной пленки зависит от химической природы полимера.

Работа выполняется при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы», Проект № 2.1.1.345/11095.

Соотносящиеся публикации. 1. М.А. Ванцян, Г.В. Попова, Е.А. Карпузова, М.Ф. Бобров, Нанотехника, 2010, № 1 (21), 28-35.

Ванцян Михаил Артаваздович, старший научный сотрудник, кандидат химических наук
125047, Москва, Миусская пл., 9
Тел.: (499)978-49-97; Факс: (495)609-29-64; E-mail: galina@muctr.ru, mikhvan@yahoo.com

СПЕКТРОСКОПИЯ ФОНОН-ПОЛЯРИТОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК В ДАЛЬНОМ И БЛИЖНЕМ ПОЛЕ

Е.А.Виноградов, Н.Н.Новикова, В.А.Яковлев

Институт спектроскопии РАН, Троицк Московской обл.

Разработаны методы ИК спектроскопии, позволяющие исследовать оптические свойства сверхтонких (нанометровых и мономолекулярных слоев) неорганических и органических полупроводников на различных подложках. Методами ИК спектроскопии отражения - поглощения исследованы моно-, 3- и 11-слоевые органические пленки C18N на медных подложках, приготовленные методом Лэнгмюра-Блоджет, а также самоорганизующиеся монослоевые пленки биомолекул HDPA на подложках TiO₂/TiN/Nitinol, используемых при приготовлении имплантантов для суставов.

Методами спектроскопии поверхностных поляритонов, имеющих высокую чувствительность к переходным слоям и к адсорбатам на поверхности, изучены пленки нанометровой толщины окиси магния и нитрида алюминия на сапфире. Обнаружен резонанс поверхностного поляритона подложки с колебательными возбуждениями пленки. Из экспериментальных данных восстановлена дисперсия поверхностных поляритонов. В кривых дисперсии поверхностного поляритона сапфира наблюдается расщепление, пропорциональное квадратному корню из толщин пленок MgO и AlN даже для пленок толщиной 10-30 нм, в то время как в спектрах внешнего отражения эти пленки не видны. Определены толщины пленок, получены частотные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости пленки и подложки. Для самых тонких пленок MgO (10 нм) они оказались близки к оптическим постоянным массивного кристалла окиси магния, что свидетельствует о высоком качестве пленок, приготовленных методом магнетронного напыления. Продемонстрирована высокая чувствительность методов ИК спектроскопии поверхностных поляритонов для определения оптических постоянных (характеризации) сверхтонких пленок.

Виноградов Евгений Андреевич, профессор, член-корр. РАН
142190, Троицк Московской обл., ул.Физическая, д.5
Тел.: (496)7510579; Факс: (496)7510886; E-mail: evinogr@isan.troitsk.ru

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТОВ GaSe@УНТ И GaTe@УНТ

А.А.Волыхов^{1,2)}, Л.В.Яшина^{1,2)}, А.А.Елисеев¹⁾, М.В.Харламова¹⁾, С.В.Савилов¹⁾,
Я.В.Зубавичус³⁾, А.И.Белогорохов²⁾

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

²⁾ *ОАО «ГИРЕДМЕТ», Москва*

³⁾ *НИЦ «Курчатowski институт», Москва*

В работе получены квазиодномерные кристаллы GaSe и GaTe внутри каналов одностенных углеродных нанотрубок (УНТ). Синтез нанокomпозитов GaX@УНТ был выполнен путём капиллярного заполнения каналов УНТ расплавом халькогенидов. Кристаллическая структура одномерных кристаллов определена методами просвечивающей электронной микроскопии, EXAFS-спектроскопии, а также квантово-химическим расчётом с полной оптимизацией геометрии в методах теории функционала плотности и присоединённых плоских волн. Электронное строение определено теоретически, а также методами спектроскопии комбинационного рассеяния и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

В результате исследования выявлено, что образующиеся в каналах УНТ одномерные кристаллы халькогенидов галлия имеют однотипные структуры, отвечающие направлению $[1\ 0\ -1\ 0]$ в объёмной структуре гексагональных модификаций халькогенидов галлия. По сравнению с объёмной структурой происходит увеличение периода кристаллической решётки, а также перераспределение расстояний внутри элементарной ячейки.

Результаты исследования электронной структуры нанокomпозита позволяют заключить, что локальное взаимодействие между одномерным кристаллом и углеродной нанотрубкой отсутствует, но происходит некоторый перенос заряда с нанотрубки на одномерный кристалл за счёт выравнивания их уровней Ферми.

Волыхов Андрей Александрович, м.н.с.

119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Тел.: 8(495)9394665; Факс: 8(495)9390998; E-mail: andyvolikhov@yandex.ru

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОТОЛЩИННЫХ ПЛЕНОК YbAs_2S_4 С РАЗЛИЧНОЙ СУБСТРУКТУРОЙ

Э. Ш. Гаджиев

Институт физики Национальной Академии Наук Азербайджана, Баку

В настоящей работе приводятся результаты электронографических исследований условий формирования пленок YbAs_2S_4 с различной субструктурой, полученных вакуумным осаждением.

Пленки YbAs_2S_4 толщиной ~ 30 нм, препарированные испарением синтезированного вещества на кристаллы NaCl , KCl , NaBr , LiF , KJ и на целлулоид, находящиеся при комнатной температуре получают в аморфном состоянии. На электронограмме наблюдаются диффузные кольца, соответствующие значениям $S = 4\pi \sin \theta / \lambda$: $S_1 = 11,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_2 = 20,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_3 = 34,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_4 = 54,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_5 = 72,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_6 = 91,0 \text{ нм}^{-1}$; $S_7 = 108,0 \text{ нм}^{-1}$. Испарение YbAs_2S_4 на подогретые подложки до 543 К приводит к образованию поликристаллической пленки с известной ромбической решеткой с параметрами $a = 1,134$, $b = 1,304$, $c = 0,391$ нм. При увеличении температуры подложек выше 543 К образуются пленки, электронограммы от которых свидетельствуют о наличии преимущественной ориентации кристалликов. Причиной образования совершенных монокристаллических пленок со сверхпериодами является хорошее кристаллографическое соответствие сопрягающихся плоскостей подложки и новой фазы. При эпитаксиальном росте YbAs_2S_4 на NaCl одна элементарная ячейка сверхструктурной фазы сопрягается с тремя ячейками NaCl при этом относительное несоответствие сопрягающихся сеток составляет $\sim 2\%$. Монокристаллические пленки YbAs_2S_4 ориентируются плоскостью $[001]$, параллельной грани $[110]$ NaCl . Пленки YbAs_2S_4 , выращенные на монокристаллических NaCl при $T_{\text{п}} 623 - 643$ К были монокристаллические с высокой степенью совершенства. По точечным электронограммам были определены периоды решетки, которые оказались равными $a_{\text{св.стр.}} \approx 2a_0 = 2,263$; $b_{\text{св.стр.}} \approx 2b_0 = 2,606$; $c_{\text{св.стр.}} \approx 2c_0 = 0,780$ нм.

Гаджиев Эльман Шамхал оглы, в.н.с
371143, Баку, пр.Г.Джавида 33, Институт Физики НАНА
Тел.: 994(12)4395140; Факс: 994(12)4470456; E-mail: el_kj@rambler.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СВЕРХТВЕРДЫХ
ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ИСПАРЕНИЯ
КОМПОЗИТНЫХ КАТОДОВ С ПЛАЗМЕННЫМ АССИСТИРОВАНИЕМ**

Р.М. Галимов¹⁾, Н.А. Тимченко¹⁾, Н.Н.Коваль²⁾, О.В. Крысина²⁾, А.Н.Шамаков³⁾

1) Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

2) Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

3) Институт катализа СО РАН, Новосибирск

Эксплуатационные свойства поликристаллических упрочняющих покрытий в значительной степени определяются особенностями их структурно-фазового состояния, уровнем внутренних напряжений, дефектностью структуры и размерами кристаллитов. Уменьшение размеров кристаллитов до нескольких десятков нанометров в покрытиях на основе нитрида титана при допировании такими элементами, как Si, Cu, Al и др., приводит к увеличению твердости покрытия до 40 ГПа и выше. Но закономерности и механизмы образования нанокристаллического состояния таких покрытий, получаемых наиболее эффективным методом испарения композитных катодов в дуговом разряде низкого давления, в настоящее время полностью не выявлены. Использование таких методов исследования характеристик упрочняющих покрытий, как просвечивающая и сканирующая электронная микроскопия, AES-спектроскопия, ВИМС и др., не достаточно для получения информации о структурно-фазовом состоянии многокомпонентных нанокристаллических покрытий и для решения проблемы управления синтезом структуры с заданными свойствами.

В предлагаемом докладе приводятся результаты исследований структуры нанокристаллических покрытий и их элементного состава с использованием синхротронного излучения. Показано наличие в покрытиях кристаллических и аморфных фаз, определено их соотношение. Полученные результаты позволяют установить, что механизмом формирования нанокристаллического покрытий на основе нитрида титана при добавлении в его состав легирующих элементов (нейтральных и нитридообразующих) является образование вокруг кристаллитов нитрида титана аморфных слоев состоящих из атомов примеси.

Галимов Руслан Маликович

634050, Томск, пр. Ленина, д.2а

Тел.: (3822)417939; Факс: (3822)423934; E-mail: z-group@bk.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО-МОРИЯ В МНОГОСЛОЙНОЦ СИСТЕМЕ Y/Dy МЕТОДОМ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

С.В. Григорьев¹⁾, D. Lott²⁾

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

²⁾*Helmholtz Zentrum Geesthacht, 21502 Geesthacht, Germany*

Металлические итрий-диспрозиевые многослойные системы упорядочиваются в когерентную спиновую спираль, проникающую через всю многослойную структуру. В нашем исследовании определялась средняя киральность такой магнитной структуры для нескольких образцов с различной толщиной слоев Dy и Y, причем в работе использовался метод рефлектометрии поляризованных нейтронов. Оказалось, что магнитное поле, прикладываемое в плоскости многослойной системы, приводит к ненулевой киральности в системе, которая, по-видимому, сцеплена с нескомпенсированным магнитным моментом спирали внутри одного слоя. Величина киральности имеет сложное поведение в зависимости от температуры и магнитного поля. Можно показать, что она определяется конкуренцией взаимодействий – РККИ взаимодействия внутри слоя диспрозия и РККИ взаимодействия между соседними слоями диспрозия. Вся совокупность экспериментальных данных позволяет провести реконструкцию и схематическую визуализацию спиновой структуры в такой многослойной системе. Несмотря на сложную зависимость средней киральности от температуры и магнитного поля, можно показать, что угол поворота между интерфейсными плоскостями спинов двух соседних слоев имеет один и тот же знак для всех образцов и любых экспериментальных условий. Мы предполагаем, что именно антисимметричное взаимодействие Дзялошинского-Мория проявляется через знак угла поворота, что в результате и приводит к ненулевой средней киральности системы.

Григорьев Сергей Валентинович, в.н.с.
188300, Гатчина, Ленинградской обл., Орлова роща, ПИЯФ РАН
Тел.: (813)7146121; Факс: (813)7139023; E-mail: grigor@npni.spb.ru

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР GaAs/Al₂O₃

А.А.Дедюхин, П.Н.Крылов, И.В.Федотова

Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

Так называемые пространственно-модулированные структуры, к которым, в частности, относятся мультислойные пленки и гранулированные сплавы, являются объектами интенсивных исследований, а также представляют интерес с точки зрения их практического применения.

Целью настоящей работы было комплексное исследование физических свойств мультислойных наноструктур GaAs/Al₂O₃ (по 18 слоев GaAs и Al₂O₃), полученных на сверхвысоковакуумной установке для напыления ультратонких пленок импульсно-лазерным испарением [1].

Для выбора оптимальных режимов нанесения слоев и определения скоростей их роста изучались также процессы лазерного напыления чистых пленок GaAs и Al₂O₃. В качестве подложек использовали химически очищенные пластины монокристаллического кремния с ориентацией (111) и кварцевое стекло. Для повышения эффективности формирования пленок и уменьшения их шероховатости на подложки перед напылением структур наносили выравнивающий подслой оксида алюминия толщиной 1000 Å.

Исследования проводились на эллипсометре ЛЭФ-3М-1, атомно-силовом микроскопе SOLVER P47-PRO, электронном микроскопе ПЭМ-125, дифрактометре ДРОН-3, спектрофотометрах СФ-26 и ИКС-29.

Установлены закономерности изменения структур после их отжига в вакууме при температурах 600°C, 700°C, 800°C, 900°C. Показано, что показатель преломления структур и их шероховатость зависят от температуры и времени отжига.

1. А.А.Дедюхин, П.Н.Крылов, И.В.Федотова Сверхвысоковакуумная установка для напыления ультратонких пленок импульсно-лазерным испарением //Вакуумная техника и технология. 2010, Т. 20, №1. С. 9-19

Дедюхин Александр Александрович
426034, Ижевск, ул. Университетская, д.1
Тел.: (341-2)916133; E-mail: ftt2@udsu.ru

ИЗУЧЕНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $\text{SiO}_2(\text{Co})/\text{GaAs}$ МЕТОДАМИ ПОВЕРХНОСТНОГО РАССЕЯНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А. Дядькина¹⁾, Н.А. Григорьева²⁾, С.В. Григорьев¹⁾, А.А. Воробьев³⁾, В.А. Уклеев¹⁾,
Л.В. Луцев⁴⁾, А.И. Стогний⁵⁾, Н.Н. Новицкий⁵⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

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

³⁾ *Europien synchrotron radiation facility, France*

⁴⁾ *Физико-технический институт РАН, Санкт-Петербург*

⁵⁾ *Научно-практический центр НАНБ по материаловедению, Белоруссия*

Гигантский инжекционный магниторезистивный эффект наблюдается в гранулированной Co/SiO_2 пленке на полупроводниковой GaAs подложке в узком интервале температур вблизи $T = 300$ К. Согласно существующей теории природа эффекта связана со структурой и физическими свойствами интерфейсного слоя. Методами рефлектометрии и малоуглового рассеяния синхротронного излучения в скользкой геометрии изучено пространственное распределение наночастиц кобальта в объеме гранулированной пленки Co/SiO_2 и на границе раздела гранулированной плена/полупроводниковая подложка (ГП/ПП). Показано, что в объеме пленки характерное среднее расстояние между гранулами кобальта составляет 7,3 нм. В то же время, среднее расстояние между гранулами на интерфейсе ГП/ПП составляет 32 нм при их вертикальном размере порядка 7,5 нм. Экспериментальные результаты свидетельствуют о пониженной концентрации кобальта на интерфейсе и о точечном характере контакта основного объема пленки Co/SiO_2 с подложкой GaAs через относительно разреженный слой ферромагнитных гранул кобальта.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-02-01231-а).

Дядькина Екатерина Анатольевна

188300, Ленинградская обл., Гатчина, Орлова роща

Тел.: (81371)46185; Факс: (81371)39023; E-mail: katy@ins.pnpi.spb.ru

ТОРЦЕВАЯ СТРУКТУРА МНОГОСЛОЙНЫХ КОМПОЗИЦИЙ $(\text{CdSe-PbSe})_n$

Н.В. Замараева¹⁾, Л.Н. Маскаева¹⁾, А.Н. Ермаков²⁾, В.Ф. Марков¹⁾

¹⁾ ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

²⁾ Институт химии твердого тела УРО РАН (ИХТТ)

Послойное гидрохимическое осаждение индивидуальных соединений CdSe, PbSe является одним из путей получения высокообогащенных твердых растворов $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Se}$, способных в зависимости от состава изменять ширину запрещенной зоны.

Объектами исследования в настоящей работе являются мультислойные пленки структуры $(\text{CdSe-PbSe})_n$, сформированные последовательным гидрохимическим осаждением слоев селенида кадмия и селенида свинца на ситалле марки СТ-150-1 из реакционных смесей, содержащих соль металла, лиганд (цитрат натрия для Pb^{2+} , аммиак для Cd^{2+} , который одновременно выполняет роль щелочного агента), селеномочевину. В качестве антиоксиданта селеномочевину использовали сульфит натрия. Температура синтеза составляла 353 К при длительности процесса формирования каждого слоя от 15 до 60 мин. Число слоев варьировалось от 1 до 4.

Для применения синтезированных тонкопленочных композиций необходимо знать их состав по толщине. В настоящей работе этот вопрос решен путем анализа торцевых поверхностей синтезированных сэндвич-структур методами растрово-электронной, атомно-силовой микроскопии и данных рентгенографии.

В результате построения профилограммы торцевой поверхности было обнаружено присутствие в пленке твердых растворов $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Se}$ различного состава и стехиометрии. Сопоставление данных электронной микроскопии мультислойных пленок $(\text{CdSe-PbSe})_n$ с результатами рентгенофазового анализа позволило установить только фазы на основе селенида свинца, выступающего базовым при формировании твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Se}$ ($0 < x \leq 0,53$).

Замараева Нина Викторовна

623794, Свердловская обл., Артемовский р-н, ул. Театральная, д.25 А, кв. 22.

Тел.: 8(909)0060097; E-mail: nina6131@mail.ru

МЕТОДЫ МИКРОДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И РЕНТГЕНОГРАФИИ В ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРЫ НАНОДИСПЕРСНЫХ ФЕРРИТОВЫХ ПОРОШКОВ

Н.А.Запорина, А.Я.Круминя, Я. П.Грабис, Л. В.Кузнецова

*Институт неорганической химии Рижского Технического Университета,
Саласпилс, Латвия*

Методами микродифракции (МД) электронов и рентгенофазового анализа (РФА) изучена структура ферритовых нанопорошков: 1 – NiFe_2O_4 , полученных химическим методом в реакции горения, используя в стехиометрических соотношениях нитрат железа и хлорид никеля с добавкой лимонной кислоты и/или глицина в качестве внутреннего горючего; 2 – порошок 1, с последующим нанесением на него меди путем восстановления его оксида; 3 – порошок NiFe_2O_4 , полученный плазменным способом (в радиочастотной индукционной азотной плазме).

Установлено, что синтезированные порошки нанодисперсны (от 15 до 38,5 нм). Выявлены структурные отличия нанопорошков NiFe_2O_4 , в зависимости от условий синтеза. Наиболее однородны (однофазны) порошки, полученные плазменным способом.

Изучение магнитных характеристик порошков показало что магнитными свойствами в большей степени обладают однофазные порошки, т. е. порошки, полученные плазменным способом. Т.о. магнитные свойства изученных ферритовых нанопорошков в большой степени зависят от способа их получения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Европейского Структурного Фонда /European Structural Funds; Project Nr. 2009/0215/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/082

Dr. Chem Запорина Нина Андреевна
Латвия LV-2169, Саласпилс-1, Миера, 34 Институт неорганической химии Рижского Технического Университета
Тел.: (371) 67542049; Факс: (371) 67800779; E-mail: naz@latnet.lv

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПОСТЕПЕННОЙ ДЕГРАДАЦИИ ZnSe – СОДЕРЖАЩИХ
МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР – АКТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ЛАЗЕРОВ С
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ И ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКАМИ**

М.М. Зверев¹⁾, Н.А. Гамов¹⁾, Е.В. Жданова¹⁾, С.В. Иванов²⁾, Д.В. Перегудов¹⁾,
И.В. Седова²⁾, С.В. Сорокин²⁾, В.Б. Студенов¹⁾

¹⁾ *Московский институт радиотехники, электроники и автоматики, Москва*

²⁾ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*

В последние годы благодаря использованию ZnSe-содержащих квантоворазмерных структур в лазерах с электронно-лучевой накачкой удалось уменьшить значения рабочей энергии электронов до 4-10 кэВ при комнатной температуре [1], достичь значений выходной импульсной мощности в зеленом диапазоне спектра более 600 Вт [2]. Активный элемент таких лазеров – многослойная наноструктура – в процессе работы находится под воздействием как излучения накачки (электронного пучка), так и собственного лазерного излучения. Изменение свойств таких структур в течение длительной работы лазера, определяющее срок службы приборов, практически не изучено.

В настоящей работе проведены результаты исследований зависимости выходной мощности излучения импульсных лазеров на основе многослойных ZnSe-содержащих наноструктур с электронно-лучевой и оптической накачками от времени их работы при частоте следования импульсов 50 Гц. Использовались структуры, выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии [1]. Для накачки использовался либо электронный пучок длительностью около 0.3 мкс с энергией 8 кэВ, либо – излучение азотного лазера. Показано, что с течением времени работы наблюдается постепенное уменьшение выходной мощности лазера. Скорость деградации возрастает с ростом температуры образца и начального значения выходной мощности, и, по-видимому, резко уменьшается при понижении концентрации исходных дефектов структуры. Показана возможность работы в течение нескольких часов (T=300K) без снижения выходной мощности.

1. М.М. Зверев, Н.А. Гамов и др. Письма в ЖТФ, 33, 24, стр. 1-7, 2007.

2. M. M. Zverev, S. V. Ivanov et al. Phys. Status Solidi B 247, No. 6, 1561-1563, 2010.

Зверев Михаил Митрофанович, профессор
119454, Москва, пр. Вернадского, 78
Тел.: 8(495)4347664; Факс: (495)4348665; E-mail: mzverev@mail.ru

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ПЕРВАПОРАЦИОННЫХ МЕМБРАН

И.Н. Иванова¹⁾, Гу. Тörök²⁾, С.В. Кононова³⁾,
В.В. Шаманин³⁾, Ю.В. Кульвелис¹⁾, В.Т. Лебедев¹⁾,

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова,
г. Гатчина Ленинградской обл.*

²⁾ *Research Institute for Solid State Physics & Optics, Budapest, Hungary*

³⁾ *Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучены первапорационные мембраны (полиамидоимид, молекулярная масса $MM = 55 \cdot 10^3$, синтез в ИВС РАН) в диапазоне переданных импульсов $q = 0.2-2 \text{ nm}^{-1}$ (дифрактометр “Yellow Submarine”, Budapest). Мембраны - градиентные структуры с широким распределением пор по размерам ($10^1 - 10^3 \text{ nm}$, рис.1). Анализ интенсивности рассеяния $I(q)$ показал, что главный наноразмерный элемент мембран – сферические поры (радиус $R_S \approx 14 \text{ nm}$, рис.2), которые не видны с помощью электронной микроскопии. Фурье-преобразованием функции $I(q)$ найдена корреляционная функция пор $G(R) \sim R^2\gamma(R)$, где $\gamma(R)$ подчиняется зависимости для сферы $\gamma_S(R) = 1 - (3/4)(R/R_S) + (1/16)(R/R_S)^3$. Обсуждается связь селективных свойств и наноструктуры мембран.

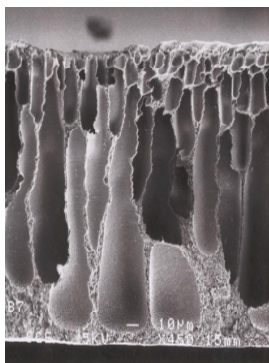


Рис.1. Строение мембраны.

Иванова Ирина Николаевна

188300, г. Гатчина, Орлова Роща 1, ПИЯФ

Тел.: (81372)46396; Факс: (81371)39023; E-mail: irniva@npni.spb.ru

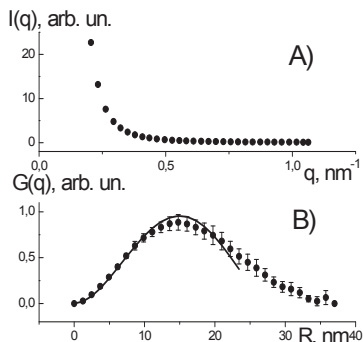


Рис.2. Интенсивность рассеяния $I(q)$ (A), корреляционная функция $G(R)$ в зависимости от радиуса R (B). Линия – функция аппроксимации по модели сфер радиусом $R_S \approx 14 \text{ nm}$.

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МЕЗО-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

А.В. Казак¹⁾, Н.В Усольцева¹⁾, С.Г. Юдин²⁾, К.А. Дембо²⁾, В.В. Волков²⁾

¹⁾ *НИИ Наноматериалов Ивановского государственного университета, Иваново*

²⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Структура реализованных надмолекулярных систем в значительной мере зависит от особенностей химического строения соединений их формирующих. Если производные фталоцианина как объекты тонкопленочных технологий исследованы достаточно подробно, то для производных порфирина данные по зависимости их надмолекулярной организации в тонких пленках от строения конкретных лигандов и их металлокомплексов носят единичный характер. Поэтому в настоящей работе изучалось влияние особенностей молекулярной структуры производных порфирина на надмолекулярную организацию в пленках Ленгмюра-Шеффера.

С целью изучения связи между молекулярной структурой производных порфирина с их надмолекулярной организацией, было проанализировано 10 новых лигандов и их металлокомплексов (Zn, Cu, Ni, Pd) с мезо-замещением в молекуле. Тонкие пленки формировали из растворов исследуемых соединений в хлороформе на установке фирмы ФГУП «ГНЦ «НИОПИК» (Москва) методом Ленгмюра-Шеффера при поверхностном давлении $\pi = 0.4$ мН/м. Надмолекулярную организацию изучали с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния на автоматическом дифрактометре HECUS, Австрия.

Установлено, что модельные представления о надмолекулярной организации хорошо согласуются с экспериментальными данными малоуглового рассеяния.

Авторы выражают благодарность за предоставленные производные порфирина д.х.н. проф. Семейкину А.С. и к.х.н. с.н.с. Быковой В.В.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 16.740.11.0206, № 14.740.11.0470 ФЦП Минобрнауки РФ.

Казак Александр Васильевич, аспирант
153025, Иваново, ул.Ермака, д.39
Тел.: (4932)370808; Факс: (4932)324766; E-mail: s_kazak@list.ru

СТРУКТУРА ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ ПЛЕНОК PbS_ySe_{1-y}

А.С.Катышева¹⁾, В.И.Воронин²⁾, В.Ф.Марков¹⁾, Л.Н.Маскаева¹⁾

¹⁾ ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург

²⁾ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

Твердый раствор PbS_ySe_{1-y} – перспективный полупроводниковый материал, свойства которого зависят от состава. В настоящей работе проведено исследование фазового состава и структуры тонких пленок PbS_ySe_{1-y} , полученных путем соосаждения PbS и PbSe при температуре 353 К в течение 90 минут из реакционной смеси, содержащей соль свинца, лиганд, щелочной агент, тиомочевину и селеномочевину.

Структурные исследования пленок проведены на дифрактометре ДРОН-УМ1 в медном излучении в интервале углов $2\theta = 20-75^\circ$ в режиме пошагового сканирования с шагом $0,02^\circ$ и временем накопления сигнала в точке 5 с. Уточнение структурных параметров проводилось методом полнопрофильного анализа Ритвельда с использованием программы Fullprof.

При анализе рентгенограмм совместно осажденных пленок в системе PbS–PbSe обнаружена только кубическая фаза со структурой NaCl ($B1$), период которой зависит от состава пленок. Для образцов пленок индивидуальных PbS и PbSe величина постоянной решетки составила 0,5932 и 0,6180 нм соответственно. Повышение соотношения концентраций селеномочевины к тиомочевине с 0,04 до 0,07 в реакционной смеси сопровождается значительным увеличением содержания селенида свинца в твердом растворе. Формульный состав пленок твердых растворов, полученных при указанных соотношениях, будет иметь вид $PbS_{0,89}Se_{0,11}$ и $PbS_{0,23}Se_{0,77}$.

Полученные результаты служат экспериментальным подтверждением возможности гидрохимического получения пленок твердых растворов PbS_ySe_{1-y} различного состава ($0 \leq y \leq 1$) методом соосаждения сульфида и селенида свинца.

Катышева Анна Сергеевна

620002, Екатеринбург, ул.Мира, д.28, каф.ФикХ

Тел.: (343)3759318; Факс: (343)3743884; E-mail: annakaty@mail.ru

АСМ ИССЛЕДОВАНИЯ БУФЕРНЫХ СЛОЕВ РАЗЛИЧНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ ДЛЯ ВТСП ПРОВОДОВ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ

Л.В. Клевалина¹, Ю.В. Грищенко¹, М.Л. Занавескин¹, А.Н. Марченков¹
В.В. Клечковская², А.С. Орехов²

1) НИЦ «Курчатовский институт», Москва

2) Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

В настоящее время огромный интерес представляет задача получения ВТСП проводов 2-го поколения. На их основе может быть реализован ряд устройств для электротехники и электроэнергетики с совершенно новыми характеристиками. Главное отличие ВТСП 2-го поколения перед первым поколением проводов заключается в наличии преимущественной ориентации кристаллитов сверхпроводящей фазы, которое обеспечивает большую плотность критического тока. Выбрана трехслойная архитектура буферных слоев $Y_2O_3/YSZ/CeO_2$ для последующего роста ВТСП слоя. Формирование буферных слоев происходило с применением метода импульсного лазерного напыления.

Целью данной работы являлось исследование кристаллографической ориентации и остроты текстуры буферных слоев с помощью рентгеновской дифракции, дифракции быстрых электронов на отражение, а также изучение особенностей рельефа поверхности сформированных буферных слоев с различной степенью ориентации с помощью АСМ-методики. Была изучена связь особенностей рельефа поверхности и составом, кристаллографической ориентацией и остротой текстуры буферных пленок.

Лидия Васильевна Клевалина, лаборант
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1
Тел.: (499)1967784; E-mail: patriot-spqr@yandex.ru

СТРУКТУРА ИМПЛАНТИРОВАННЫХ НАНОМЕТРИЧЕСКИХ СЛОЕВ ФЕРРОГРАНАТОВ

О.В. Коваленко, В.Г. Кириченко

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков

Одним из эффективных методов обработки эпитаксиальных нанометрических пленок феррогранатов (ФГ) является ионная имплантация. Пленки ФГ наносили методом ионно-лучевого распыления мишени изотопом ^{57}Fe на различные подложки. Элементный анализ пленок ФГ производили с использованием спектрометрии резерфордского обратного рассеяния. Глубина анализируемого слоя составляла до 3 мкм. Фазовый состав поверхностных слоев тонких пленок ФГ определяли с помощью мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe в геометрии обратного рассеяния при регистрации электронов внутренней конверсии (МСКЭ). Глубина анализируемого слоя составляла до 0,3 мкм. Имплантацию ионов H^+ проводили с энергией $E=1,5$ МэВ и флюенсом 10^{17} см $^{-2}$, ионов He^+ с энергией 26 кэВ и дозой $\Phi=2,25 \cdot 10^{14}$ см $^{-2}$. По мессбауэровским данным пленки ферритов-гранатов, полученные различными способами напыления, сразу после приготовления находятся в парамагнитном состоянии. Элементный состав пленок ФГ по данным СПОР неоднороден по толщине пленок. Концентрация кислорода понижена в верхнем поверхностном слое, глубиной до 0,5 мкм. Практически во всех случаях в верхних поверхностных слоях (до 0,2-0,4 мкм) понижена концентрация железа и иттрия. Концентрация компонент стабилизируется в диапазоне толщин пленок 0,5-2,0 мкм. На границе с подложкой концентрация кислорода, железа, иттрия уменьшается. Аморфные пленки феррит - гранатов, трансформируются в кристаллические магнитоупорядоченные слои при отжиге выше 900К. Послойный анализ пленок по данным МСКЭ приводит к выводу о сегрегации железа в поверхностном слое и переменном фазовом составе аморфных пленок.

Облучение ионами He^+ с $E=26$ кэВ ФГ *после* протонного облучения $E=1$ МэВ, $\Phi=10^{17}$ см $^{-2}$ приводит к увеличению угла наклона оси легкого намагничивания $\bar{\theta}$ до 78°. Облучение только ионами He^+ с $E_2=26$ кэВ приводит к повороту ОЛН в плоскость пленки ($\bar{\theta}=90^\circ$).

Коваленко Ольга Владимировна

Украина, Харьков, пр. Курчатова, 31. ФТФ ХНУ.

E-mail: kirichenko@pht.univer.kharkov.ua, val_kir48@mail.ru

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ

Б.Н. Кодесс, П.Б. Кодесс

ФГУП «ВНИИМС»- МЦНИ, г. Москва

Проведены измерения микроструктурных характеристик сплавов и соединений с различной концентрацией дефектов упаковки с использованием стандартных образцов и мер (аттестованные характеристики - параметр кристаллической решетки и величина физического уширения Брэгговских отражений, соответствующая нанометровому диапазону фрагментов объемных наноматериалов). Дифракционная картина получена во всем диапазоне углов (от 15 до 165 град.). Оценка концентрации дефектов упаковки произведена по отклонению значений углов максимумов Брэгговских отражений от значений, соответствующих экстраполяционной зависимости этих максимумов. Такая зависимость строится обычно для определения значений параметров решетки кристаллической с более высокой точностью и для оценки вкладов в погрешности на различных угловых диапазонах при определении межплоскостных расстояний для соответствующих атомных плоскостей. Для определения значений физического уширения Брэгговских отражений использованы Государственные стандартные образцы на основе дифракционных свойств кремния, ПРФ-3, и, гексаборида лантана, ПРФ-12. В этих ГСО кроме аттестованных значений параметра кристаллической решетки, значения уширения Брэгговских отражений, приняты за инструментальные (инструментальная форма профилей, соответствующая минимальному значению микроискажений кристаллической решетки и высоким значениям размеров блоков мозаики. Для них дифракционная картина была зарегистрирована в том же диапазоне углов. Микроструктурные характеристики рассчитаны на основе данных об угловой зависимости физического уширения Брэгговских отражений, которая позволяет разделить вклады размеров блоков мозаики и микроискажений кристаллической решетки.

Полученные значения физического уширения соответствуют размеру блоков мозаики в тестовых образцах (мерах) в диапазоне 10-15 нм. Результаты хорошо воспроизводились на различных образцах из данной партии мер и при использовании дифрактометров различных фирм. Это позволяет использовать такие меры при аттестации методик измерения микроструктурных характеристик и оценки влияния применения различных существующих приближений и программного обеспечения при расчетах характеристик.

Кодесс Борис Николаевич, д.ф.-м.н.

119361 г. Москва, ул. Озерная, д. 46

Тел.: 8(499)7920705; Факс: 4375666; E-mail: bnkodess@vniims.ru

СТРУКТУРНЫЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МНОГОСЛОЙНОЙ СВЕРХПРОВОДНИКОВОЙ НАНОСИСТЕМЫ Nb/Al/AIO_x/Nb

А.И. Козлов¹⁾, А.Л. Гудков¹⁾, А.А. Гогин¹⁾,
А.И. Козлитин²⁾, Е.П. Кириленко²⁾, А.Ю. Трифонов²⁾

¹⁾ ЗАО "Компэлст", Москва, Зеленоград.

²⁾ ФГУП "НИИФП им. Ф.В. Лукина", Москва, Зеленоград.

В последнее время получила широкое развитие технология формирования джозефсоновских туннельных переходов на основе сверхпроводниковой гетероструктуры Nb/Al/AIO_x/Nb. Джозефсоновские туннельные переходы (переходы SIS типа) используются в сверхпроводниковых интегральных схемах (СПИС) преобразователей частота – напряжение в современных квантовых эталонах Вольта постоянного тока, а также в приемниках диапазона от 100 ГГц до 1 ТГц. Однако технология формирования джозефсоновских туннельных переходов с заданными характеристиками сильно зависит от совершенства и качества сверхпроводниковой гетероструктуры.

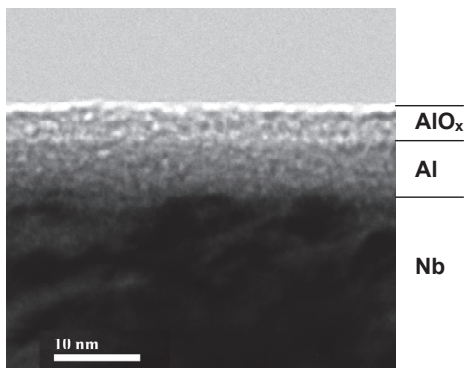


Рис. 1. ПЭМ изображение фрагмента тестовой структуры Nb/Al/AIO_x.

В настоящей работе были проведены подробные исследования структуры и элементного состава многослойной наносистемы Nb/Al/AIO_x/Nb с использованием методов профильного Оже анализа и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ и ПРЭМ) (Рис. 1). Особое внимание при исследовании наносистемы Nb/Al/AIO_x/Nb было уделено качеству границ раздела, и их атомарной резкости.

Благодаря комплексу проведенных исследований удалось не только установить связь структуры с электрическими характеристиками джозефсоновских туннельных переходов Nb/Al/AIO_x/Nb, но и объяснить причины разброса их параметров по площади кристалла СПИС.

Козлов Анатолий Иванович
124460, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д. 6
Тел.: 8(499)7312533; Факс: 8(499)7315592; E-mail: gudkov@niifp.ru

ВРЕМЕННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ОКСИДАХ ПОСЛЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

И.Л. Коммель, Б.Н. Кодесс, П.Б. Кодесс

ФГУП «ВНИИМС» - МЦНИ, г. Москва

Проведены измерения характеристик дифракционной картины мелкодисперсных пероксидов бария и высокочистого кремния (из партии эталонных стандартных образцов) в зависимости от дозы облучения мягким рентгеновским излучением и в зависимости от числа циклов механической обработки образцов из этой же партии материалов, которая приводят к дополнительному измельчению порошков до размеров присущих наноматериалам. Высокая скорость вращения ротора с твердосплавными наконечниками обеспечивали мгновенное измельчение за счет передачи большого механического импульса.

Увеличение числа циклов, приводит к плавному изменению значений физического уширения высокоугловых Брэгговских отражений и соответственно характеристик микроструктуры. Такое же изменение физического уширения обнаружено в пероксиде бария после облучения, временные зависимости характеристик, показывают стремление к насыщению.

Для кремния влияние механической обработки на физическое уширение Брэгговских отражений намного слабее (особенно в малоугловой области), что может определяться ковалентной природой химической связи атомов в кристаллической решетке. Нам не удалось обнаружить признаков насыщения даже после 18 циклов обработки.

Установленные зависимости характеристик дифракционной картины пероксидов бария отличаются от обнаруженного ранее [1] осцилляционного характера изменения временных характеристик дифракционной картины купратов иттрия и бария с высоким уровнем метастабильности, в котором аномалии также определяются изменением геометрии системы барий-кислородных химических связей.

1. В.Н. Kodess, Nature, K096, p1-7, 1996; Б.Н.Кодесс, М.Т. Медетбеков Процессы самоорганизации структурных параметров в ВТСП материалах. ВНИИМС, 25 Декабря 1995, Москва, Депозит ВИНТИ, 1996, 48А, № 2075-В96;

Комель Игорь Лембитович
E-mail: bnkodess@vniims.ru

**ОЖЕ И РЕНТГЕНОФОТОЭЛЕКТРОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТА
POR-Si/SnO_x, СФОРМИРОВАННОГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЩНОГО ИОННОГО ПУЧКА
НАНОСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ**

П.М. Корусенко, В.В. Болотов, Е.В. Князев, В.С. Ковивчак, А.А. Корепанов,
С.Н. Несов, С.Н. Поворознюк

Омский филиал института физики полупроводников СО РАН, Омск

Композиты на основе por-Si и оксидов металлов являются перспективными материалами для устройств микро - и наносенсорики, в первую очередь, из-за чрезвычайно развитой поверхности. Использование мощных ионных пучков (МИП) при создании данных материалов интересно, главным образом из-за возможности получения целой иерархии структурно-фазовых состояний на больших толщинах за счёт протекания сильно неравновесных коллективных процессов различной природы. Для формирования композита por-Si/SnO_x использовали протон - углеродный (H - 30%, C - 70%) пучок с энергией 300 кэВ, длительностью 60 нс, плотностью тока до 50 А/см². Исследования структуры, элементного и фазового состава проводились с использованием методов оже-, рентгенофотоэлектронной спектроскопии (RIBER) и растровой электронной микроскопии (Jeol JSM-6610LV).

Исследовано влияния облучения на формирование композита por-Si/SnO_x с разной пористостью матрицы. Установлено, что облучение МИП приводит к образованию шарообразных частиц с диаметром до 200 нм и формированию в приповерхностном слое различных неравновесных оксидных фаз с избытком кислорода. Послойное ионное травление показало снижение по глубине коэффициента стехиометрии для оксидов SnO_x и SiO_x. Обнаруженное различие спектров валентной зоны для образцов с различной пористостью, по-видимому, связано с нарушением внутрикластерного упорядочения, которое влияет на характер гибридизации валентных электронов атомов Sn, находящихся как внутри, так и вблизи дефектных областей материала. Установлена зависимость интегральной интенсивности валентной полосы от структурных параметров композита.

Корусенко Петр Михайлович, аспирант
644018, Омск, ул.5 кордная, д.29

Тел.: 8(3812)560174; Факс: 8(3812)560174; E-mail: korusenko@obisp.oscsbras.ru

**КОМПЛЕКСНАЯ МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ С
НАНОМЕТРОВЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С
ВЫСОКИМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ РАЗРЕШЕНИЕМ**

И.А.Костановский, В.П.Афанасьев, А.А.Батраков

Московский энергетический институт (ТУ), Москва

Задача контроля физических и химических свойств оксидных пленок (покрытий) на поверхности чистых материалов получила большое распространение в последние десятилетия. Для контроля поверхности важно знать химический состав полученных покрытий, микроструктуру. Оксид алюминия является на сегодняшний день одним из наиболее ясно изученных оксидных соединений.

В процессе атмосферной оксидации чистого алюминия происходит образования аморфного оксидного слоя с сильно размытой границей раздела слоя и подложки, что требует подробного исследования получаемого интерфейса. Вопрос контроля морфологии образовавшегося оксидного слоя предложено решать с помощью электронной спектроскопии. Предлагается комплексное применение электронной спектроскопии пиков упругоотраженных электронов (EPES или ERBS) и Рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) для решения этой задачи.

В работе представлены спектры EPES с энергетическим сканированием (энергия первичного электронного пучка 10 кэВ, 12 кэВ, 14 кэВ) мишеней чистого Al с тонким оксидным слоем (несколько нанометров) на поверхности и корунда. Для контроля элементного состава поверхности мишеней использовалась методика XPS. Расшифровка спектров EPES проводилась в рамках классического квазиоднократного приближения для уравнения переноса излучения. Совместное использование методик EPES и XPS позволяет восстанавливать послойные профили концентрации кислорода в поверхности с нанометровым разрешением.

Костановский Илья Александрович
111250, Москва, Красноказарменная ул. д. 14, НИО НОЦ «Нанотехнологии»
Тел.: 8(495)3627533; E-mail: KostanovskiyIA@mpei.ru

АТОМНАЯ, ЭЛЕКТРОННАЯ И МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА НЕКОТОРЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ: АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES И XMCD

А.Н.Кравцова¹⁾, К.А.Ломаченко¹⁾, А.П. Чайников¹⁾, А.В. Солдатов¹⁾, С. Передков²⁾,
M. Neeb²⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ Центр материалов и энергии им. Гельмгольца, Берлин

Проведено исследование атомного строения, электронной и магнитной структуры некоторых нанокластеров магнитных материалов на основе анализа спектров рентгеновского поглощения в ближней к краю области (XANES), рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD) и расчетов, выполненных в рамках теории функционала плотности.

Спектры рентгеновского поглощения свободных нанокластеров Nb⁺ и Co⁺ были измерены на линии UE52-PGM Центра материалов и энергии им. Гельмгольца (Берлин, Германия). Отбор кластеров по массам осуществлялся с использованием ионной ловушки Пеннинга и масс-спектрометра FT-ICR. Nb M_{4,5}-XANES и Co L_{2,3}-XMCD спектры нанокластеров Nb⁺₁₃ и Co⁺₁₂ были получены путем регистрации числа фрагментов мономеров и димеров Nb и Co, образовавшихся при взаимодействии кластерного пучка с рентгеновским излучением.

Выполнены расчеты Nb M_{4,5}-XANES спектров кластера Nb⁺₁₃ на основе двух теоретических методик: метода полного многократного рассеяния в рамках маффин-тин приближения для формы молекулярного потенциала и полнопотенциального метода конечных разностей. Вычисления проводились для нескольких структурных моделей Nb⁺₁₃. Сопоставление экспериментального Nb M_{4,5}-XANES с теоретическими спектрами позволило определить наиболее вероятную модель структуры кластера Nb⁺₁₃.

Проведены вычисления Co L_{2,3}-XMCD спектра Co⁺₁₂. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Работа выполнена при частичной поддержке Грантом Президента Российской Федерации МК-4283.2010.2.

Кравцова Антонина Николаевна, доцент
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5
Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2975120; E-mail: akravtsova@sfsedu.ru

ВЛИЯНИЕ ИОННОЙ ОБРАБОТКИ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И СТРУКТУРУ ПЛЕНОК ITO

П.Н. Крылов¹⁾, Ф.З. Гильмутдинов²⁾, Р.М. Закирова¹⁾

¹⁾Удмуртский государственный университет, Ижевск

²⁾Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск

Методом реактивного ВЧ магнетронного распыления получены тонкие пленки оксида индия, легированного оловом (ITO), в кислородно-аргоновой смеси]. Температура осаждения составила 50 и 100 °С. Во время распыления проводилась ионная обработка поверхности пленок ионами аргона и кислорода. Ток ионного источника составлял 0, 30, 50, 70 мА.

Рентгенофазовый анализ (ДРОН-6, Co-K α излучение) показал, что пленки, полученные при 50 °С без ионной обработки, являются рентгеноаморфными. Наличие ионной обработки приводит к появлению кристалличности и преимущественной направленности зерен вдоль направления [100], нормального к поверхности пленок. Пленки, полученные при температуре 100 °С без ионной обработки, являются поликристаллическими. Ионная обработка приводит к уширению дифракционных линий и преимущественной ориентации [100].

Рентгеноэлектронная спектроскопия (ЭС-2401 с Mg-K α -возбуждением) показала, что энергия связи O1s, Sn3d_{5/2} и In3d_{5/2} пиков составляют соответственно 530,2-530,4; 486,4 и 444,4 эВ. Это соответствует степени окисления металлических атомов +4 и +3 и образованию соединений In³⁺ (In₂O₃) и Sn⁴⁺ (SnO₂). Пик индия уширен в сторону больших энергий связи, что может быть связано с образованием сложного оксида, в состав и структуру которого входят катионы обоих металлов, и атомы индия могут находиться в различных неэквивалентных позициях. С увеличением тока ионной обработки при формировании пленок относительная доля катионов олова незначительно снижается.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОБЛОКОВ МОЗАИЧНОГО КРИСТАЛЛА ПО УГЛАМ ОРИЕНТАЦИИ НА ОСНОВЕ РАССЕЯНИЯ ШИРОКОПОЛОСНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.С. Кубанкин^{1,2)}, В.И. Алексеев¹⁾, П.Н. Жукова²⁾, Э. Иррибарра²⁾, Н.Н. Насонов²⁾,
Р.М. Нажмудинов^{1,2)}, В.И. Сергиенко¹⁾

¹⁾ *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

²⁾ *Белгородский государственный университет, лаборатория радиационной физики, Белгород*

В работе [1] на основе кинематической теории дифракции рентгеновских лучей в кристаллах разработана аналитическая модель взаимодействия синхротронного излучения (СИ) с мозаичным кристаллом, учитывающая произвольный вид функции распределения зерен мозаичных кристаллов по углам ориентации. Показана возможность определения функции распределения зерен мозаичных кристаллов по углам ориентации, основанная на измерениях ориентационной зависимости энергии брэгговского рефлекса рассеянного изучаемым образцом широкополосного СИ. Показано, что зависимость энергии коллимированного рефлекса от угла ориентации мишени относительно падающего зондирующего пучка СИ оказывается в определенных условиях пропорциональной функции распределения зерен по углу мозаичности в плоскости реакции. Основным из отмеченных условий является малость изменения спектра первичного пучка СИ в частотном интервале вблизи брэгговской частоты, ширина которого определяется угловым размером коллиматора излучения. Для получения двумерной функции распределения зерен по углам мозаичности достаточно повторить измерения ориентационной зависимости энергии брэгговского рефлекса для мишени, повернутой на 90 градусов вокруг оси исследуемой кристаллографической плоскости.

В настоящей работе на основе [1] разработана методика и представлены результаты экспериментального исследования двумерной функции распределения зерен мозаичных кристаллов по углам ориентации. Экспериментальная установка создана на основе вакуумного гониометра, позволяющего измерять функцию распределения с точностью $7.1 \cdot 10^{-5}$ Рад. В качестве первичного широкополосного излучения использовалось тормозное излучение рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом и фокальным пятном 48 мкм, рефлекс регистрировался p.i.n. детектором. Выполнено измерение двумерной функции распределения зерен по углам ориентации различных кристаллов, показана возможность асимметричного распределения мозаичности.

1. А.С. Кубанкин, П.Н. Жукова, М.С. Ладных, Н.Н. Насонов // "Известия РАН. Серия физическая", 2011, Т.75, №2, С.244-246.

АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИУРЕТАН / ПОЛИФТОРАЛКИЛЬНЫЙ МОНТМОРИЛЛОНИТ

С.В.Кудашев, Н.А.Рахимова, А.В.Нистратов

Волгоградский государственный технический университет

Эффективность монтмориллонита как нанонаполнителя полимеров связана с его способностью к интеркаляции (внедрению) мономеров и полимеров в межслоевое пространство с последующим расслоением (эксфолиацией) на монослои нанометровой толщины с высокой анизотропией формы, диспергированные в полимерной матрице. В качестве нанонаполнителей использовались композиты слоевого натриевого алюмосиликата монтмориллонита (ММТ, нанослои толщиной порядка 1 нм и диаметром 20-250 нм) с полифторированными спиртами-теломерами (ПФС) типа $\text{H}(\text{CF}_2\text{CF}_2)_n\text{CH}_2\text{OH}$ со степенью теломеризации $n = 2-5$ – 1,1,5-тригидроперфторпентанол-1 (ПФС2), 1,1,7-тригидроперфторгептанол-1 (ПФС3) и 1,1,9-тригидроперфторнонанол-1 (ПФС4), 1,1,11-тригидроперфторундеканол-1 (ПФС5) и диацетатом-ди-ε-капролактамом меди $[\text{Cu}(\text{HN}(\text{CH}_2)_5\text{C}(\text{O}))_2](\text{OCOCH}_3)_2$ (ДДКМ).

Двумерные дифракционные картины получали в виде 2D-дебаеграмм по методу Дебая-Шеррера на дифрактометре Bruker X8 APEX ($\lambda = 0,152$ нм) с двухкоординатным детектором типа Imaging Plate (IP). Обработку 2D-дебаеграмм проводили с помощью программы Fit2D. Наличие формирования нано-центров в объеме эластомерной матрицы видно по появлению регулярной морфологии типа концентрических колец со все увеличивающимися радиусами, изначально отсутствовавшие в немодифицированном материале по причине его аморфности. Данный факт говорит о значительной доли интеркалированных (внедренных) макромолекулярных цепей в наногалереи органоглины и формировании смешаннослойной наноструктуры.

Нистратов Андриан Викторович, доцент
400131, Волгоград, проспект Ленина, 28
Тел.: 8(917)8300958; E-mail: kudashev-sv@yandex.ru

БЕСКОНТАКТНОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КАНАЛЫ

Х.Т.Ле¹⁾, Н.Н.Насонов¹⁾, Г.П.Похил²⁾

¹⁾*Лаборатория радиационной физики, Белгородский гос. Университет,
Белгород*

²⁾*НИИ ЯФ МГУ, Москва*

Электронные и ионные пучки широко используются для диагностики материалов. Одной из важнейших практических задач диагностики является транспортировка пучков от источника до мишени. В последнее время активно исследуется оригинальный метод, основанный на бесконтактном прохождении заряженных частиц через вакуумные диэлектрические каналы. В работе изучается принципиальный и нерешенный окончательно вопрос о механизме, обеспечивающем отталкивание проходящих ионов от стенок канала. Рассматривается взаимодействие быстрого иона с заряженными осевшими частицами стенками плоского диэлектрического канала. Предлагается и исследуется модель процесса, учитывающая дискретность и случайность расположения на стенке осевшего заряда, а также «выключение» поля равномерно заряженной плоскости, поскольку такое же, но противоположно направленное поле создается другой стенкой канала. Быстрый ион испытывает случайную последовательность толчков со стороны расположенных вблизи его траектории зарядов, осевших на стенке. Соответственно, траектория иона ищется в виде суммы быстро осциллирующей под действием флуктуаций поля составляющей и медленно меняющейся координаты относительно плоскости. Метод разделения быстрого и медленного движений иона аналогичен методу среднего поля в статистической радиофизике. Вследствие случайного характера действующего на ион поля его траектория не является ни периодической, ни условно периодической, а сила, приводящая к систематическому смещению иона относительно стенки является нестационарной. Характер усредненного движения существенно зависит от начальной поперечной координаты иона, плотности осевших ионов и взаимных корреляций между осевшими частицами на малых расстояниях. Выполненные численные и аналитические расчеты показали существование области параметров задачи, в которой движущийся ион отталкивается от стенки канала, что объясняется действием градиентных сил Гапонова-Миллера, обусловленных в данном случае дискретностью осевшего на стенке заряда и обеспечивающих бесконтактное прохождение ионов через канал.

Ле Хоай Тхи
308015, Белгород, ул. Победы, д. 85
Тел.: 84722301807; E-mail: nnn@bsu.edu.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАБЛЮДЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ C₆₀F₁₈ НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА НИКЕЛЯ

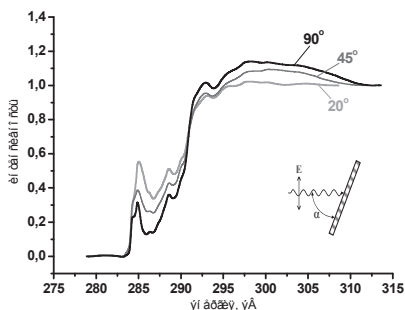
А.М. Лебедев¹⁾, К.А. Меньшиков¹⁾, Н.Ю. Свечников¹⁾, В.Г. Станкевич¹⁾,
Л.П. Суханов¹⁾, М.М. Бржезинская^{2,3)}

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²⁾ BESSY, 12489 Berlin, Germany,

³⁾ ALBA Synchrotron Light Source, 08290 Barcelona, Spain

Фторид C₆₀F₁₈ имеет сравнительно низкую, по отношению к чистому фуллерену C₆₀, молекулярную симметрию C_{3v}, что обусловлено расположением атомов фтора только на одной стороне сферического каркаса C₆₀. Эта асимметрия приводит к большому электрическому дипольному моменту молекулы ~10Д, поэтому данный фторид может быть интересен с точки зрения возможности создания упорядоченных структур нанометрового масштаба, что может быть востребовано в нанoeлектронике, нелинейной оптике и т.п.



В настоящей работе исследована околороговая тонкая структура рентгеновских спектров поглощения (NEXAFS) монослойной пленки C₆₀F₁₈, осажденной на подложке Ni (100). Наблюдаемая угловая зависимость спектров (см. рис.) дает основание предполагать, что имеется анизотропия направления дипольных моментов осажденных молекул, и они ортогональны поверхности подложки.

Кроме того, методом теории функционала плотности рассчитаны положения 1s- уровней энергии C и F для молекулы C₆₀F₁₈, которые согласуются с результатами измерений спектров пленок. Идентифицирована тонкая структура электронных переходов 1s→π* и 1s→σ* NEXAFS спектров, объяснены угловые зависимости. Теоретически показано, что наиболее выгодной по энергии является перпендикулярная ориентация оси молекулы C₆₀F₁₈ относительно поверхности монокристалла Ni (100).

Лебедев Алексей Михайлович

123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1

Тел.: 8(499)1969017; E-mail: aml@kcsr.kiae.ru

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТИТАНА ПРИ ОКИСЛЕНИИ

Л.Л. Лев, В.Г. Назин, М.Н. Михеева, В.А. Роголёв

НИЦ «Курчатовский институт»

Были измерены фотоэлектронные спектры валентной зоны и различных остовных энергетических уровней для поверхности титана, очищенной с помощью вольфрамовой щетки, и этой же поверхности при различных дозах кислорода и различных энергиях фотонов. В спектрах валентной зоны поверхности титана при энергии возбуждающих фотонов $\hbar\omega = 150$ эВ (глубине выхода фотоэлектронов менее 1 нм) даже при дозе кислорода порядка 900 Лэнгмюр присутствует значительная эмиссия из электронных состояний металла вблизи уровня Ферми. Спектры $Ti\ 3p$ и $Ti\ 2p$ уровней свидетельствуют о том, что окисление титана происходит с образованием различных промежуточных оксидов. По-видимому, рост окисла титана происходит со значительным отклонением от планарной геометрии. Вблизи пиков $Ti\ 3p$ уровня и в валентной зоне свежеччищенного образца были замечены пики при энергиях связи 30,6 эВ и 3,6 эВ, ранее не наблюдавшихся при исследовании титана. Появление этих пиков может быть объяснено присутствием в зондируемом слое образца областей оксида титана с составом, близким к стехиометрическому, у которого уровень Ферми расположен вблизи дна запрещенной зоны.

Лев Леонид Леонидович, н.с.
123182, Москва, пл. Курчатова, д.1, НИЦ «Курчатовский институт»
Тел.: 8(499)1969521; Факс: 8(499)1965973; E-mail: ll_ru@mail.ru

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ НАНОМЕТРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ ГРАФИТА

В.Н. Леонов, В.Г. Кириченко, О.В. Коваленко

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков

Создание необычных моноатомных углеродных плоских структур (графен, графан) вызывает необходимость исследования новых свойств моноатомных слоёв графита и их связи с особенностями электронного строения атомов углерода в различных модификациях. В качестве объекта исследования использовался высоко ориентированный кристалл графита. Исследование поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии проводили на сканирующем туннельном микроскопе СТМ – 1. Техника секционирования позволяет представлять в виде 3D-диаграмм различные варианты возможных структур и типов ячеек. В результате анализа 3D-диаграмм наряду со структурами с характерными размерами и симметрией элементарной ячейки графита, обнаруживаются и проявляются, начиная с построения диаграмм с одновременным учетом первых и вторых соседей, тетрагональные структурные особенности симметрии центральных атомов построенных ячеек. Для анализа этих эффектов целесообразно ввести треугольные ячейки, имеющие различные ближайшие соседи. Для анализа полученных данных можно ввести параметры: Z^+ -вертикальное смещение атомов вверх; Z^- -вертикальное смещение атомов вниз; x -поперечное смещение атомов в слое. Полученные зависимости смещения $Z^+(\bullet)$ и $Z^-(\blacklozenge)$ от I_{gx} для построенных ячеек позволяют сделать вывод, что вертикальное смещение в ячейке 1×1 значительно больше, чем ячейки 7×7 на всех уровнях масштабирования. При анализе самоподобных ячеек в зависимости от поперечных смещений x определены значения коэффициентов подобия, которые лежат в диапазонах 3,5 - 4 и 35- 40 в ячейке 1×1 и ячейке 7×7 , соответственно. Мультимасштабная неоднородность поверхности графита обусловлена межатомным взаимодействием атомов углерода в графите и возможно, наследственно трансформируется новым углеродным объектам – фуллеренам, нанотрубкам, графену, графану etc.

Леонов Владислав Николаевич

Украина, Харьков, пр.Курчатова, 31. ФТФ ХНУ

kirichenko@pht.univer.kharkov.ua, val_kir48@mail.ru

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В МАГНИТНЫХ ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ Ge-3d МЕТАЛЛ

М.А. Любомирский¹⁾, С.Н.Якунин²⁾, А.Ю. Серёгин¹⁾, Е.Ю. Терещенко¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Курчатовский Институт, Москва*

Планарные наноструктуры, состоящие из слоев Ni и Ge (системы полупроводник-3d металл) проявляют специфические магнитные свойства, представляющие интерес для технологов [1] (появление асимметрии петли гистерезиса, возрастание коэрцитивной силы и т.д.). Одним из факторов, влияющих на свойства данных систем, является формирование переходного слоя на границе раздела Ni/Ge. В данной работе проведено исследование взаимосвязи изменений структуры границы раздела между слоями Ni и Ge, происходящих под действием отжига, с магнитными свойствами данных систем.

Объекты исследования – бислойные структуры Ni/Ge, полученные послойным напылением на стеклянную подложку (при температуре подложки 373К) в Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН (И.С. Эдельман). Напыление производилось методом ионно-плазменного распыления при давлении 10^{-6} Торр в атмосфере аргона. Были изготовлены образцы со следующими толщинами слоев Ni и Ge: 150/460 и 330/460 ангстрем. Вакуумный отжиг образцов выполнялся при температуре 553К и давлении 10^{-7} Торр.

Исследования проводились методом рентгеновской рефлектометрии и методом стоячих рентгеновских волн (СРВ) в области полного внешнего отражения (ПВО). Эксперименты выполнялись на рентгеновском дифрактометре с вращающимся анодом SmartLab (ИК РАН) (излучение Cu K α) и на синхротронной станции «Ленгмюр» РНЦ «Курчатовский институт» (энергия излучения – 13.8 кэВ, регистрировалось флуоресцентное излучение Ni K α и Ge K α).

Методом рентгеновской рефлектометрии были определены толщины слоев, параметры переходных слоев и профили электронной плотности по толщине слоистой системы. Методом СРВ в области ПВО определены профили распределения элементов Ni и Ge по глубине.

Проведено сопоставление изменений в профилях распределения никеля и германия, произошедших под действием отжига, с магнитными свойствами образцов.

1. И.С. Эдельман, Г.С. Патрин, Д.А. Великанов/Письма в ЖЭТФ. Том 87, вып 5, с. 310-313 (2008г.).

Любомирский Михаил Андреевич

119333, Москва, Ленинский просп., д. 59

Тел.: 8(926)5340469; E-mail: lyubomirskij@physics.msu.ru

**ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ И ХАРАКТЕРИСТИК МЕЖАТОМНОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ СОЕДИНЕНИЙ $A^I B^{III} C_2^{VI}$ СО СТРУКТУРОЙ
ХАЛЬКОПИРИТА**

А.И. Мададзада, Э.Э. Алакбарова, Д.И. Исмаилов
Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

Сложные тройные полупроводниковые соединения $A^I B_n^3 C_m^6$ с упорядоченными вакансиями, образующиеся на разрезах $A_2^I C^{IV} - B_2^{III} C_3^{VI}$ (где, А–Cu; В–In,Ga; С–S,Se), сейчас привлекают к себе большое внимание в связи с их широкими возможностями использования в качестве материалов для создания высокоэффективных тонкопленочных фотопреобразователей солнечной энергии [1,2]. Большинство этих соединений как например–Cu(In,Ga)(S,Se)₂ кристаллизуется в структуре халькопирита. Структура и свойства этих полупроводников зависят от методов и условий синтеза, температуры подложек и стехиометрии состава полученных образцов (как кристаллических, так и тонких пленок). Еще одной особенностью халькогенидных полупроводников указанной системы является, как было замечено в [3], температурная зависимость структурных фазовых переходов из структуры халькопирита в сфалеритную. Так например, для CuInS₂(Se₂) характерны структурные фазовые переходы типа порядок-беспорядок в небольшом интервале температур ~10К, для CuGaS₂ – вообще не наблюдается температурной зависимости структурных фазовых переходов, а CuGaSe₂ характеризуется тем, что в нем наблюдается сосуществование тетрагональной и кубической фаз.

В настоящей работе проводятся полученные данные рентгенофазового и химического анализа и электронографии (исследования фазаобразования и структуры) как тонких пленок CuInS₂(Se₂) и CuGaS₂(Se₂), полученных методом термического напыления на подогретые подложки NaCl, KCl и LiF при одновременном и последовательном испарении. Все полученные данные не противоречили известными из литературы [3-4] данным и часто совпадали. При испарении богатых In пленок CuInS₂ из одного источника в интервале температур 250-500°C, при T=400°C наблюдалась слабая, новая фаза, которая индифицировалась, как CuIn₅Se₈, что подтверждается исследованиями, проведенными в [5].

- 1.S.B. Zang, S.H.Wei, A.Zunger, A. Katayama-Yosida-Phys.Rev. B57, (1998) p.9642
2. U.Rau, H.W.Schock – Appl. phys. A.69, (1999), p.131
3. F.O. Adurodja, M.I. Carter and R.Hill – Thin Solids films 338, (1999) 13
4. S. Shorr, G.Geandiev, B.V.Korzun – Phys. Stat.Sol.(c) 3, (2006) p.2610
5. И.В. Боднарь – Неорган.матер. 44,№2 (2008) с.144

Мададзада Афаг Иса
Az-1143, Баку, пр.Г.Джавида 33
Тел.: 994(12)4395140; E-mail: a.i.madadzada@gmail.com

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА ТРАПЕЦИЕВИДНОЙ МОДЕЛИ СВЕРХРЕШЕТКИ С ДЕФЕКТОМ УПАКОВКИ

А.М. Манукян

Ереванский государственный университет

В работе [1] развита динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на одномерной гетерозипитаксиальной сверхрешетке с дефектом упаковки между слоями. Выведен коэффициент отражения в зависимости от скачка фазы на дефекте упаковки и глубины его залегания. Исследовано изменение интенсивности сателлитов для квадратичной модели сверхрешетки.

Искусственные сверхрешеточные кристаллы на основе гетеропереходов представляют из себя систему чередующихся слоев разных составов с близкими межплоскостными расстояниями (типа GaAs-AlAs). Со временем происходит взаимная диффузия гетероматериалов, входящих в состав бислоя, и квадратичная модель уже не подходит для описания сверхрешетки. Поскольку процесс диффузии происходит медленно, вначале, когда между слоями гетероматериалов образуются диффузные слои, сверхрешетка описывается трапециевидной моделью.

В настоящей работе проведено теоретическое исследование зависимости интенсивности рентгеновских лучей, отраженных от сверхрешетки с дефектом упаковки, от степени взаимной диффузии гетероматериалов. Проведено сравнение результатов со случаем, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя. Показано, что с увеличением взаимной диффузии гетероматериалов происходит перераспределение интенсивности. При этом величина основного максимума уменьшается, а величина осцилляций увеличивается.

1. А.М.Манукян. Дифракция рентгеновских лучей на гетерозипитаксиальной сверхрешетке с дефектом упаковки. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2007, № 10, стр. 17-21.

Манукян Асмик Микаеловна
375025, Республика Армения, Ереван, ул.А.Манукяна 1,
Тел.: 374(10)553246; Факс: 374(10)151087; E-mail: hasmikm@ysu.am

**ДИАГНОСТИКА ПОДПОВЕРХНОСТНЫХ ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ В
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НИЗКОЧАСТОТНЫХ
ФЛУКТУАЦИЙ ТОКА В ТУННЕЛЬНОМ КОНТАКТЕ**

В.Н.Манцевич¹⁾, А.И.Орешкин¹⁾, В.И.Панов¹⁾, Н.С.Маслова¹⁾, С.И.Орешкин²⁾

¹⁾ *Московский государственный университет, Москва*

²⁾ *Государственный астрономический институт, Москва*

Данная работа посвящена теоретическому и экспериментальному изучению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$ на чистой поверхности и над изолированными примесными атомами на сколотой поверхности кристалла InAs. Обнаружено, что локализованные состояния, образованные индивидуальными примесными атомами, являются определяющими в низкочастотной составляющей спектра туннельного тока. Для объяснения экспериментальных результатов предложена теоретическая модель, учитывающая многочастичное взаимодействие электронов проводимости с внезапно включающимися потенциалами Кулона на примесном атоме и на зондирующем острие СТМ.

Предложена и развита экспериментальная методика измерений низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока на поверхности полупроводников методом СТМ/СТС.

Представленная методика измерений и предложенная теоретическая модель, описывающая формирование в области туннельного контакта низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$ позволяют идентифицировать различные примесные атомы и их зарядовые состояния по особенностям низкочастотной составляющей спектров туннельного тока.

Манцевич Владимир Николаевич, м.н.с.

119991, Москва, Ленинские горы, д.1 к.2

Тел.: 8(495)9392502; Факс: 8(495)9391104; E-mail: vmantsev@yahoo.com

МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НАПОЛНИТЕЛЯ ГРАНУЛИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ «Fe / ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ МАТРИЦА»

А.Н.Маратканова, С.Ф.Ломаева, А.А.Шаков

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск

Гранулированные композиты "ферромагнитный металл / диэлектрическая матрица" вызывают большой интерес благодаря своим уникальным свойствам, позволяющим использовать их в СВЧ-диапазоне. При получении композитов важно сформировать межфазный слой, который обеспечил бы максимальную химическую "совместимость" частиц наполнителя и матрицы.

В работе предложен подход, основанный на получении частиц наполнителя методом высокоэнергетического размола металла в органической среде, химически близкой составу диэлектрической матрицы, используемой в дальнейшем для получения магнитодиэлектрических композитов.

Метод механического измельчения является одним из наиболее простых, эффективных и перспективных способов получения наноструктурированных материалов с контролируемыми размерами и формой частиц и зерен. Использование органических сред при измельчении позволяет создать переходный слой на поверхности металлических частиц, стабилизируя и защищая их от окисления, а также обеспечивая их химическую "совместимость" с матрицей, и как следствие, лучшую адгезию.

Металлические включения композитов получены совместным высокоэнергетическим размолотом порошков Fe с различными полимерами (полиэтилен, полистирол и т.д.) и парафином, а также добавками поверхностно-активных веществ в шаровой планетарной мельнице Fritsh-P7. Исследованы структура, фазовый состав и морфология металлических включений, а также структура переходного слоя на поверхности механосинтезированных частиц наполнителя.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-08-00158.

Маратканова Алена Николаевна
426000, Ижевск, ул.Кирова, д.132
Тел.: (3412)216966; Факс: (3412)722529; E-mail: alnima08@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК ТИТАНА МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

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

Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Основой нейтронно-оптических поляризаторов, анализаторов и поляризующих монохроматоров являются многослойные поляризующие покрытия. Ранее авторами было установлено, что основными факторами, усиливающими отражение нейтронов с нежелательными спинами от многослойных поляризующих покрытий, являются немагнитные области на межслойных границах и окисный слой на поверхности.

В работе [1] был предложен, теоретически обоснован и экспериментально проверен новый метод улучшения поляризующих нейтронных покрытий. Он сводится к использованию слоев определенной толщины с отрицательным потенциалом для подавления отражения нейтронов с нежелательным спином от потенциальных барьеров, образованных структурными несовершенствами. В работе получены формулы для расчета оптимальной толщины таких «антибарьерных» слоев. Новый метод улучшения поляризующих нейтронных покрытий с помощью нанопрослоек Ti получил экспериментальное подтверждение [1-2], а покрытия с прослойками были названы суперполяризующими.

Данная работа является продолжением ряда работ выполненных в ПИЯФ по усовершенствованию метода суперполяризующих покрытий. В ходе работы были исследованы процессы окисления титановых пленок толщиной 5-40 нм в условиях естественного окисления, а также в условиях отжига.

1. N.K. Pleshnikov, Nucl. Instrum. Methods A 613 (2010) 15-22. - Superpolarizing neutron coatings: theory and first experiments.
2. Н.К. Плешанов, А.П. Булкин, В.Г. Сыромятников, Физика твердого тела, т. 52, вып.5 (2010) 954-956. - Экспериментальное подтверждение нового метода улучшения поляризующих нейтронных покрытий.

Матвеев Василий Александрович
188300, Гатчина, Орлова Роща, Петербургский институт ядерной физики РАН
Тел.: (+7 81371)46973; Факс: (+7 81371)39053; E-mail: matveev@ins.pnpi.spb.ru

ДЕФТОРИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА В РЕЗУЛЬТАТЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ОБЛУЧЕНИЯ

А.Д. Мокрушин¹⁾, Е.В. Егоров¹⁾, Л.А. Песин²⁾

¹⁾Институт проблем технологии микроэлектроники РАН, Черноголовка

²⁾Челябинский государственный педагогический университет, Челябинск

Актуальной задачей микро и наноэлектроники является разработка технологии создания планарной схемотехники на гибких подложках. Одним из направлений решения этой задачи представляется поиск методов получения проводящих и полупроводниковых областей на поверхностях полимерных диэлектрических подложек путем радиационно-стимулированной карбонизации тонкого поверхностного слоя материала самих этих подложек. Таким материалом может быть диэлектрическая пленка поливинилиденфторида (ПВДФ), которая обладает хорошей механической гибкостью, высокой химической инертностью и тепловой стабильностью. Ранее показано, что воздействие ионизирующего облучения любого вида вызывает уменьшение содержания фтора в приповерхностном слое пленки ПВДФ при неизменном количестве содержания углерода. Карбонизация поверхности дает основание полагать, что при достаточном радиационном воздействии можно добиться появления проводимости, обусловленной формированием углеродных наноструктур пониженной размерности.

В настоящей работе для непосредственного определения толщины карбонизованного слоя, образовавшегося на поверхности пленки ПВДФ в результате совместного воздействия на нее потока рентгеновского излучения и вторичных электронов, использован метод резерфордовского обратного рассеяния (POP) ионов He^+ с первичной энергией порядка 1.5 МэВ. Анализ спектров POP показал, что в поверхностном слое толщиной около 1 мкм в исходном образце относительное количество атомов С и F остается неизменным, тогда как в карбонизованной пленке имеет место существенный дефицит атомов F. Приповерхностная область глубиной до 0.1 мкм характеризуется относительным содержанием фтора 0.53, а в более глубокой области (до 1 мкм) эта величина возрастает примерно до 0.67.

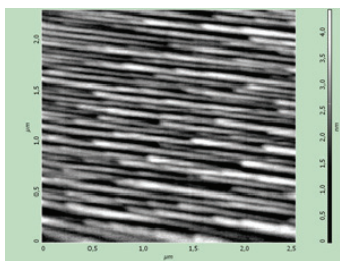
Мокрушин Анатолий Дмитриевич, с.н.с.
142432, Черноголовка, ул. Институтская, д.6
Тел.: (496)5244183; E-mail: mad@iptm.ru

ЛИНЕЙНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ ЗОЛОТА НА ПОВЕРХНОСТИ САПФИРА. АСМ И ОПТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

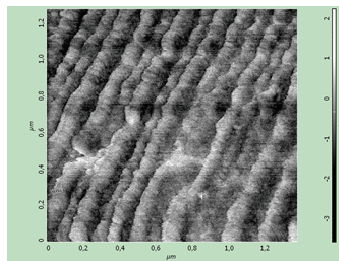
А.Э.Муслимов, Ю.О.Волков, В.Е.Асадчиков, В.М.Каневский, Б.С.Роцин, В.П.Власов
Институт кристаллографии РАН, Москва

Упорядоченные ансамбли металлических нанопроводков длиной от десятков нанометров до нескольких микрометров привлекают большой интерес благодаря их оптическим, электронным, каталитическим и др. свойствам [1-2]. В частности, анизотропия нанопроводков, расположенных на диэлектрической подложке, обуславливает расщепление полосы возбуждаемых поверхностных плазмонов на продольную и поперечную компоненты. Как правило, нанопроводки получают различными способами литографии [3]. В настоящей работе была поставлена цель: - получение нанопроводков золота путем их самоорганизации на структурированной поверхности сапфира. В работе применялись различные приемы магнетронного напыления золота с последующей термообработкой.

В качестве примера на рис. (а) приведено АСМ изображение структурированной поверхности сапфира, а на рис. (б) – та же поверхность после нанесения золота. Из рисунка видно, что золото кристаллизовалось вдоль ступеней. Различная степень термообработки показала, что лучший результат получается при отжиге 900°C. Такие образцы при оптических исследованиях показали особенности, обещающие, что данные структуры могут служить прообразом функциональных устройств нелинейной оптики.



а



б

1. Nanowires and Nanobelts \ Materials, Properties and Devices. Ed. Z.L.Wang, Kluwer Academic Publishers, USA, 2003
2. C.N.R.Rao, A.Govindaraj. Nanotubes and Nanowires \ The Royal Society of Chemistry, London, 2005
3. G.U.Kulkarni and B.Radha \ J. Royal Soc. Of Chemistry. 2010. V.2. P.2035

Муслимов Арсен Эмирбегович

119333, Москва, Ленинский просп., д.59

Тел.: 8(499)1354240; Факс: 8(499)1351011; E-mail: amuslimov@mail.ru

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ НА АДГЕЗИЮ ТОНКИХ ПЛЕНОК 3d- И 4d- МЕТАЛЛОВ НА ПОДЛОЖКАХ КАРБИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

И.В.Мутигуллин¹⁾, Д.И.Бажанов²⁾, С.Е.Кулькова³⁾

¹⁾ Учреждение Российской Академии наук Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва

²⁾ Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

³⁾ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Устойчивый интерес к исследованию металл-керамических границ раздела обусловлен широким практическим применением керамических материалов в самых различных областях современной техники: микроэлектронике, лазерной оптике, химии, физике высоких давлений, медицине и других отраслях, а так же их характеристиками, такими, как высокая прочность и тугоплавкость. А сама проблема адгезии на границах раздела металл-керамика является центральной для производства новых композитных материалов и современных покрытий.

В работе с помощью расчетов из первых принципов в рамках теории функционала плотности проведено систематическое исследование адгезии монослоев 3d- и 4d- металлов (Fe, Ni, Co, Mo, Rh) на низкоиндексных поверхностях (001) и (111) карбидов переходных металлов (TiC, NbC, VC). Впервые изучено влияние упругих деформаций (сжатия и растяжения) подложки на адгезию и магнитные свойства монослоев и тонких пленок перечисленных металлов на поверхностях карбидов. Установлено, что величина энергии адгезии монотонно зависит от величины периода решетки. Сжатие решетки подложки приводит к ослаблению связи металл-подложка, а расширение – наоборот к усилению этой связи. Также проведено изучение влияния толщины пленки на энергию адгезии, которое показывает, что энергия адгезии растет с увеличением числа атомных слоев металла. Полученные результаты могут играть ключевую роль в формировании металлических слоев на керамических подложках.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-03-00523-а.

Мутигуллин Илья Васильевич

119333, Москва, ул.Вавилова, д.40

Тел.: 8(499)1352489; Факс: 8(499)1356159; E-mail: mutigullin@gmail.com

ОБЪЕМНЫЙ ЭФФЕКТ ЙОНЕДЫ В РАССЕЯНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ТВЕРДОТЕЛЬНЫМИ МИШЕНЯМИ

Р.М.Нажмуудинов^{1,2)}, А.С.Кубанкин^{1,2)}, В.И. Алексеев²⁾, Э.Ирибарра¹⁾, Т.Х.Ле¹⁾,
Н.Н.Насонов¹⁾, В.И. Сергиенко²⁾

¹⁾*Белгородский государственный университет, лаборатория радиационной физики, Белгород*

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

При скользющем падении рентгеновских лучей на поверхность мишени в угловой структуре рассеянного излучения возникает дополнительный к зеркальному пик, реализующийся в окрестности угла полного внешнего отражения. Исследования показали, что дополнительный пик (пик Йонеды) появляется благодаря рассеянию на шероховатостях поверхности мишени. В настоящей работе показывается, что дополнительный пик может возникать вследствие рассеяния излучения в объеме твердотельной мишени. Как правило, такие мишени являются поликристаллическими, что приводит к интенсивному когерентному рассеянию на случайно ориентированных кристаллитах. Особенность рассматриваемого процесса заключается в слабой зависимости дополнительного пика от угла падения первичного излучения на поверхность мишени. Развитая теория предсказывает серию пиков, отвечающих различным векторам обратной решетки. На основе развитой теории была создана экспериментальная установка и выполнен эксперимент по наблюдению аномальных пиков Йонеды в медной мишени. В качестве источника рентгеновского излучения использовалась рентгеновская трубка с вольфрамовым анодом и фокальным пятном 48мкм. Измерения проводились в вакуумной камере с встроенным гониометром. Рассеянное мишенью рентгеновское излучение регистрировалось энергодисперсионным кремниевым дрейфовым детектором с разрешением 123эВ.

Нажмуудинов Рамазан Магомедшапиевич
308015, Белгород, ул. Победы, д. 85
Тел.: 84722301807; E-mail: nnn@bsu.edu.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ СПЛАВОВ Э110 И Э635 МЕТОДАМИ ФЭС И СХПЭЭ

В.Г. Назин, М.Н.Михеева, Л.Л.Лев, В.А.Роголев

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) и спектры характеристических потерь энергий электронов (СХПЭЭ) для чистой поверхности конструкционных циркониевых сплавов Э110 и Э635 (содержащих 1%Nb), а также поверхностей этих сплавов, подвергшихся различной степени окисления начиная с субмонослойных слоев кислорода на поверхности. Определена электронная структура этих сплавов в области валентной зоны, Zr4p уровня и Sn4d уровня, а также изменения электронной структуры при окислении. При окислении поверхности дозами 1 – 100 L (Лэнгмюр) в фотоэлектронных спектрах присутствуют и металлические и окисные компоненты спектра и увеличение дозы окисления приводит только к изменению соотношения характерных особенностей металла и окисла и отсутствуют компоненты, которые могли бы принадлежать каким-то промежуточным фазам взаимодействия циркония и кислорода. Скорости окисления сплавов Э110 и Э635, измеренные по амплитуде пика металлических состояний вблизи уровня Ферми, имеют небольшие отличия в области доз окисления 1 – 10 L, однако практически не отличаются в области доз окисления 10 – 100 L. В области 10 – 100 L скорость окисления определяется преимущественно диффузией кислорода сквозь образовавшуюся окисную пленку на поверхности металла. Сравнение этих данных с аналогичными данными для чистого циркония показало, что в области около 100 L при одних и тех же дозах кислорода относительные амплитуды пиков металлических состояний для сплавов Э110 и Э635 почти в два раза выше, чем для чистого циркония, что свидетельствует о гораздо меньшей скорости диффузии кислорода сквозь окисную пленку и большей химической стойкости для этих сплавов по сравнению с чистым цирконием.

Измерены также спектры характеристических потерь энергий электронов для поверхности сплавов Э110 и Э635 с различными дозами окисления.

Назин Валерий Георгиевич, с.н.с.

123182, Москва, пл. Курчатова, д.1, НИЦ «Курчатовский институт»

Тел.: 8(499)1969521; Факс: 8(499)1965973; E-mail: nazin@jissph.kiae.ru

О ВОЗМОЖНОСТИ РЕНТГЕНОДИАГНОСТИКИ ФОРМЫ ЗЕРЕН В НАНОМАТЕРИАЛАХ

Н.Н.Насонов, О.А.Горбунова, П.Н.Жукова П.Н.

Лаборатория радиационной физики, Белгородский гос. Университет, Белгород

Проблема измерения размеров и формы зерен в наноматериалах является весьма актуальной, поскольку свойства указанных материалов в значительной степени определяются этими параметрами. Обычный метод малоуглового рассеяния не эффективен в рассматриваемых условиях плотного заполнения образца зернами вследствие интерференции фотонов, рассеянных различными зернами. Предлагается энергодисперсионный метод измерения спектра рассеянного широкополосного рентгеновского излучения в области брэгговских пиков, возникающих благодаря периодичности решетки отдельных зерен. Показывается, что сигналы от различных зерен не интерferируют в рассматриваемой области частот, что делает выход рассеянных квантов пропорциональным усредненному по ориентациям, а также по размерам и форме квадрату модуля структурного фактора зерна. Созданная модель применима к материалам с кубической решеткой с базисом (в этом случае удается частично просуммировать по атомам суммы в структурном факторе). Форма зерна моделируется параллелепипедом с переменными основными размерами (при этом легко моделировать форму зерна в широких пределах от вытянутой до сплюсненной). Для усредненного по ориентациям структурного фактора используется формула Дебая, позволяющая практически точно учесть начальный угловой разброс излучения и конечность сечения фотонного коллиматора. Установлена связь соотношений между амплитудами различных брэгговских пиков с формой зерна. Именно данное обстоятельство открывает возможность диагностики размеров и формы зерен методом Ритвелда.

Насонов Николай Николаевич
308015, Белгород, ул. Победы, д. 85
Тел.: 84722328079; E-mail: nnn@bsu.edu.ru

СИНХРОТРОННАЯ ДИАГНОСТИКА СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР СВЕРХПРОВОДНИК/ФЕРРОМАГНЕТИК

А.М.Никитин^{1,2)}, М.М.Борисов¹⁾, Э.Х.Мухамеджанов¹⁾, Ю.Н.Хайдуков²⁾, В.Л.Аксёнов^{1,2)}

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

²⁾ *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

Взаимодействие сверхпроводящей (СП) и ферромагнитных (ФМ) фаз в слоистых наноразмерных гетероструктурах является на сегодняшний день активно исследуемой задачей. Известно, что в физике эффектов близости существенную роль играют толщины ФМ и СП слоев, а также качество СП/ФМ границы раздела. В настоящей работе проводилась характеристика слоистых гетероструктур сверхпроводник/ферромагнетик $\text{Cu}(32\text{nm})/\text{V}(40\text{-}80\text{nm})/\text{Fe}(0.5\text{-}4\text{nm})/\text{MgO}(001)$ методами рефлектометрии и диффузного рассеяния синхротронного излучения.

Измерения были выполнены на станции "Прецизионная рентгеновская оптика" на канале 6.6 Курчатовского источника синхротронного излучения. Рентгеновская рефлектометрия позволила установить толщины слоев и среднеквадратичные

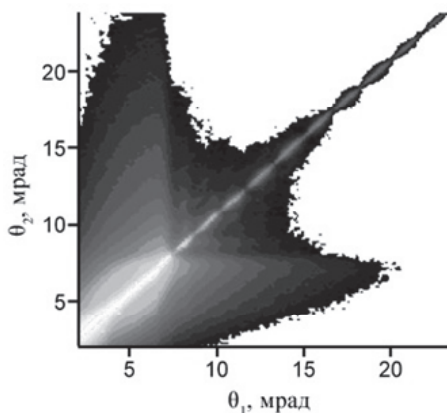


Рис. 1. Экспериментальная карта рассеяния от образца $\text{Cu}(32\text{nm})/\text{V}(40\text{nm})/\text{Fe}(1.5\text{nm})/\text{MgO}$

высоты шероховатостей на границах раздела. Найдено, что последние для границ раздела Cu/V и V/Fe не превышали 0.5 нм. Анализ карт диффузного рассеяния (рис.1) показал, что основным источником рассеяния являются неоднородности на поверхности меди со среднеквадратичной высотой порядка 5 нм и продольной длиной корреляции порядка 1 мкм. Наличие данных неоднородностей связывается с процессами окисления меди.

Никитин Артем Максимович, инженер-исследователь
123182, Москва, пл. Курчатова, 1, НИЦ "Курчатовский институт"
Тел.: (499)1967997; Факс: (499)1967723; E-mail: am.nikitin@physics.msu.ru

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СУПЕРТОНКИХ БАЗАЛЬТОВЫХ ВОЛОКОН ДО И ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ ИХ В РАСТВОРЕ СОЛЯНОЙ ИЛИ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ

С.К. Никогосян¹⁾, А.А. Саакян¹⁾, В.Б. Гавалян¹⁾, В.В. Арутюнян¹⁾, Г.Н. Ерицян¹⁾,
А.С. Оганесян¹⁾, М. Герчиков²⁾

¹⁾ Национальная Научная Лаборатория им. Алиханяна, Ереван, Армения

²⁾ Nuclear Safety Solutions Limited, MSG1X6, Canada

Измерены удельное электросопротивление по переменному ρ_{ac} и постоянному ρ_{dc} току, а также коэффициенты диэлектрической проницаемости ϵ' и диэлектрических потерь ϵ'' в интервале температур от 100 до 365K супертонких базальтовых волокон (с исходным средним диаметром $d < 10 \mu\text{m}$) до (образец 1) и после обработки их в растворе соляной (образец 2) или серной кислоты (образец 3). Для всех образцов на кривых $\rho_{ac}(T)$ можно выделить три характерных интервала. В I интервале с ростом температуры ρ_{ac} уменьшается слабее, чем во II интервале. Найдено, что для образца 1 в III интервале ρ_{ac} проявляет весьма слабую температурную зависимость, а ϵ' во всем интервале температур почти не меняется. В то время как в образцах 2 и 3 в III интервале с ростом температуры ρ_{ac} увеличивается. Для образцов 2 и 3 при определенной температуре T_m наблюдается минимум, что для образца 3 на 30 градусов выше, чем для образца 2. Установлено, что после обработки в приповерхностном слое волокна образуются новые поры различных размеров, приводящие к изменению характеристики их размерных спектров. Образующиеся поры наполняются водой, что приводит к сильному уменьшению ρ_{ac} и ρ_{dc} . Это уменьшение для ρ_{dc} значительно больше, чем для ρ_{ac} . Выявлено, что при $T = 288\text{K}$ образец 3 по сравнению с образцом 2 имеет значительно большим значением ρ_{ac} и ρ_{dc} . Наблюдаемые результаты интерпретируются в пределах механизма дипольно-релаксационной поляризации сильно и слабо связанных молекул воды.

Никогосян Сергей Коляевич, к.ф.м.н., старший научный сотрудник
375036, ул. братьев Алиханян, дом 2, Ереван, Армения
Тел: +374 10 34-44-88; Факс: +374 10 34-47-36; E-mail: nick@mail.yerphi.am

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА IN-SITU РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК В ПРОЦЕССЕ ИХ ФОРМИРОВАНИЯ

Е.Г.Новоселова¹⁾, И.С.Смирнов¹⁾, И.С.Монахов²⁾

¹⁾*Московский государственный институт электроники и математики (ТУ),
Москва*

²⁾*НИИ микроэлектроники и информационно-измерительной техники МИЭМ,
Москва*

Особенностью современной электроники является использование все более тонких слоев и переход от микро- к наноразмерным пленкам. Применение таких покрытий предъявляет повышенные требования к качеству поверхности подложки, состоянию границ раздела между слоями и однородности отдельных слоев.

В связи с этим особую значимость приобретают методы мониторинга, позволяющие измерять параметры пленочных структур непосредственно во время их формирования – in-situ методы. Применение этих методов способствует получению пленок с заданными характеристиками, позволяя оперативно корректировать режимы технологического процесса. In-situ рентгеновская рефлектометрия может быть реализована на основе анализа временной зависимости интенсивности зеркально отраженного от образца рентгеновского пучка, регистрируемой при фиксированном значении угла скольжения .

Одним из преимуществ метода in-situ рентгеновской рефлектометрии является возможность получать информацию о толщине, плотности и среднеквадратичной шероховатости поверхности растущей пленки непосредственно при проведении технологического процесса в реальном масштабе времени.

В докладе приведены результаты экспериментов по напылению наноразмерных пленок С, Al, Si, Ti, Cu, W на кремниевые подложки, на основе которых выявлены границы применимости метода и требования к процессам напыления и условиям измерения.

Новоселова Елена Григорьевна, доцент
109028, Москва, Б.Трехсвятительский пер., д.3
Тел.: 8(499)2351141; E-mail: met@miem.edu.ru

МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК, ПОЛУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ИОННОГО НАСЛАИВАНИЯ

В.В.Панчук, В.Г.Семенов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербурга

Развитие нанотехнологий ставит перед препаративной химией новые задачи прецизионного синтеза нано- и мультинанослоев, а также 2D- и 3D-наноструктур на основе неорганических, органических и гибридных (неорганических и органических) веществ. Среди методических приемов такого синтеза важное место занимают методы «химической сборки», т.е. послойного (Layer-by-Layer) синтеза. Мы использовали метод ионного наслаивания (ИН), основанный на проведении на поверхности подложки в растворах необратимых актов сорбции катионов железа (Fe^{2+}) и гидроксильных групп (OH^-), дающих при взаимодействии трудно растворимое соединение.

Целью данной работы являлась оптимизация условий получения нанослоев гидроксида железа на кремниевых и кварцевых подложках методом ионного наслаивания с регулируемой толщиной, задаваемой числом циклов ионного наслаивания. Состояния атомов железа в полученных нанослоях, исследовались методом Мессбауэровской спектроскопии на рассеяние с регистрацией электронов конверсии, сопутствующих процессу ядерного резонансного поглощения.

В результате математической обработки экспериментальных спектров, для атомов железа были получены параметры (изомерный химический сдвиг и квадрупольное расщепление), соответствующие параметрам гидроксидов железа $FeOOH$ для α и γ модификаций

Для удаления излишков воды и OH^- групп, которые могли присутствовать в пленке, с одновременным контролем возможных фазовых превращений при нагревании образец с пленкой, нанесенной на кварцевую подложку, был подвергнут термообработке в течение полутора часов при разных температурах: 160° , 350° , 500° и $750^{\circ}C$. Мессбауэровские спектры пленок, измеренных после отжига, показали, что при $750^{\circ}C$ происходит модификация исходной пленки толщиной в десятки нанометров в пленку, состоящую из оксида железа Fe_2O_3 .

Панчук Виталий Владимирович
198504, Санкт-Петербург, Университетский просп., 26, Химический факультет СПбГУ
Тел.: (812)4284039; Факс: (812)4286939; E-mail: vitpan@mail.ru

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ ПЛАСТИН КРЕМНИЯ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЕ ВОДОРОДА И АРГОНА

Е.В. Паринова¹⁾, С.Ю.Турищев¹⁾, В.А. Терехов¹⁾, О.В. Королик ²⁾, А.В. Мазаник ²⁾,
А.К. Федотов ²⁾

¹⁾ *Воронежский государственный университет, Воронеж*

²⁾ *Белорусский государственный университет, Минск*

В данной работе представлены результаты исследований пластин кремния п- и р-типа, подвергнутых обработке в низкоэнергетической плазме водорода либо аргона при различных температурах подложки. Исследования были проведены на синхротронном центре SRC (Стоутон, США) с применением метода спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure). Глубина анализа для XANES спектров L_{2,3} кремния составляла ~ 5 нм. Вакуум в экспериментальной камере составлял 10⁻¹⁰ Торр. Использовался метод регистрации тока с образца. Энергетическое разрешение составило 0,05 эВ.

Показано, что в результате обработки формируются поверхностные нанослои оксида кремния, толщиной выше естественного. Проведена оценка толщины оксидного нанослоя, формирующегося на поверхности исследованных пластин, что позволило установить толщину оксидного слоя после ионно-плазменной обработки пластин кремния в 3-5 нм, что больше толщины слоя обычного естественного оксида. Установлено, что поверхностные (несколько нанометров) слои пластин содержат «элементарный» кремний в разупорядоченном (аморфном) состоянии. Показана возможная кластеризация кремния в поверхностных слоях, как результат обработки в плазме.

Данная работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013. Данная работа выполнена на The Synchrotron Radiation Center, University Of Wisconsin-Madison, который поддерживается NSF грант No. DMR-0537588.

Паринова Елена Владимировна
394006, Воронеж, Университетская пл., д.1
Тел.: (473)2208363; Факс: (473)2208363; E-mail: ftt@phys.vsu.ru

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФТОРА ПО ГЛУБИНЕ В ПРОДУКТАХ РАДИАЦИОННОЙ КАРБОНИЗАЦИИ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

Л.А. Песин¹⁾, В.М. Морилова¹⁾, Н.А. Москвина²⁾, И.В. Грибов²⁾, В.Л. Кузнецов²⁾,
С.Е. Евсюков³⁾

¹⁾ *Челябинский государственный педагогический университет, Челябинск*

²⁾ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

³⁾ *Evonik Technochemie GmbH, Dossenheim, Germany.*

При долговременных измерениях рентгеновских фотоэлектронных спектров поливинилиденфторида (ПВДФ) его поверхность частично карбонизируется [1]. Обработка спектров свидетельствует о существовании градиента распределения фтора по глубине [2]. Целью настоящей работы была разработка модели, описывающей неоднородность концентрации фтора на различных расстояниях от поверхности. Исследовались пленки ПВДФ марки Кунаг толщиной 50 мкм (Atofina, Франция) и две пленки марки Ф–2МЭ толщиной 20 и 60 мкм (ОАО «Пластполимер», Россия).

Глубина анализа в методе РФЭС зависит от кинетической энергии фотоэлектронов. Используя результаты [3], нам удалось оценить средние длины свободного пробега F1s и F2s электронов (2,2 и 4 нм, соответственно). Для определения средней концентрации фтора в пределах анализируемой толщины приповерхностного слоя вычислялся интеграл от функции, описывающей изменение концентрации фтора по мере удаления вглубь от поверхности [4]. Сравнение с экспериментальными данными позволило определить параметры этой функции: $n(0)$ – концентрацию фтора на поверхности образца и α – коэффициент поглощения рентгеновского излучения, одновременно характеризующий градиент распределения фтора по глубине. Параметр α не является постоянной величиной. Это объясняется изменением химического состава образца, и, как следствие, способности к поглощению излучения.

Авторы благодарны заведующей отделом фторполимеров ОАО "Пластполимер" Н.Н. Логиновой за предоставленные для исследования образцы.

1. Duca M. D., Plosceanu C. L., Pop T. Journal of Applied Polymer Science. Vol. 67. 2125–2129 (1998).

2. Песин Л.А., Чеботарев С.С., Кувшинов А.М. и др., Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед. № 3 .37-44 (2010).

3. Lesiak B., Zemek J., Houdkova J., et al, Polymer Degradation and Stability. 94. 1714–1721 (2009).

4. Воинкова И.В., Песин Л.А., Волегов А.А. и др. Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед. №8. 20-24 (2007).

ГИДРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ПЛЕНОК ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В СИСТЕМЕ CdS-CuS

А.О. Полепишина¹⁾, Л.Н. Маскаева¹⁾, Э.Г. Вовкотруб²⁾, В.Ф. Марков¹⁾

¹⁾ *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*

²⁾ *Институт Высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург*

Пленки на основе сульфида кадмия CdS ($E_g = 2,4$ эВ) являются одним из основных материалов при изготовлении тонкопленочных транзисторов, запирающих устройств, химических сенсоров, фоторезисторов, электролюминесцентных конденсаторов и солнечных элементов. Сульфид меди CuS ($E_g = 2,2$ эВ) используется в оптоэлектронике и солнечной энергетике, а также при производстве фотодетекторов и фотовольтаических приборов. Образование твердых растворов на основе сульфидов кадмия и меди дает возможность регулировать их физические, оптические и сенсорные свойства за счет изменения состава.

Целью настоящей работы являлось получение пленок твердого раствора замещения CdS-CuS, исследование их состава, структуры и морфологии.

С помощью расчета ионных равновесий в реакционной смеси, содержащей соли кадмия и меди $CdCl_2$ и $CuCl_2$, этилендиами $C_2H_4(NH_2)_2$ в качестве комплексообразующего и щелочного агента, тиомочевину N_2H_4CS , как поставщика ионов серы, определены условия образования индивидуальных CdS и CuS, а также потенциальная область формирования твердых растворов на их основе.

Гидрохимический синтез проводили из приведенной ванны на предварительно обезжиренные подложки ситалла марки СТ – 150 в интервале температур 333–353 К в течение 2–4 часов.

В результате были получены однородные пленки толщиной 200–400 нм, цвет которых изменялся от желтого, характерного для CdS до темно-синеного, свойственного сульфиду меди CuS.

При рентгеновском исследовании синтезированных пленок было установлено образование непрерывного ряда твердых растворов в системе CdS-CuS. Электронной микроскопией и КР-спектроскопией изучена морфология и фазовый состав как индивидуальных пленок CdS, CuS, так и твердого раствора замещения на их основе.

Полепишина Александра Олеговна

623388, Свердловская обл., г. Полевской, ул. Вершинина, д.35, кв. 89.

Тел.: 8(963)4416474; E-mail: sashka@polepishina-fm.ru

КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСПОРТА ЭКСИТОНОВ В ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ

А.Н. Поляков¹⁾, M. Noltemeyer²⁾, T. Hempel²⁾, J. Christen²⁾, М.А. Степович¹⁾

¹⁾ *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, Калуга*

²⁾ *Otto-von-Guericke-Universität-Magdeburg, Magdeburg*

Времяпролетные измерения являются широко применяемым и хорошо обоснованным методом исследования транспорта в полупроводниковых материалах. В силу электрической нейтральности экситонов для определения параметров их диффузии эффективно используются оптические измерения, в том числе и катодолюминесцентные. В качестве объектов исследования в нашей работе использовались образцы монокристаллического нитрида галлия и гетороструктуры ZnMgO/ZnO с ZnO квантовой ямой, покрытые тонкой светонепроницаемой маской с круглыми отверстиями различного диаметра: от десятых долей до единиц микрометра. Катодолюминесцентное (КЛ) излучение возбуждалось в центре отверстия пульсирующим электронным зондом растрового электронного микроскопа. Длительность импульса составляла десятки пикосекунд, а спад импульса обеспечивал реализацию измерений с разрешением не хуже сотых долей наносекунды. Время жизни экситонов непосредственно определялось по кинетике КЛ, полученной в открытой области образца, вдали от края маски.

Аналитическое решение уравнения диффузии экситонов, полученное для образцов данной геометрии, использовалось для идентификации коэффициента диффузии по экспериментальным данным при полученных значениях диаметра отверстия, времени жизни экситонов и различных значениях температуры. При помощи соотношения Эйнштейна была получена зависимость подвижности экситонов от температуры, анализ которой позволил сделать предположение об основных механизмах рассеяния, характерных для исследуемых материалов.

Поляков Андрей Николаевич

248023, Калуга, ул. Степана Разина, д. 26

Тел.: (4842)576120; (920)6170098 E-mail: andrei-polyakov@mail.ru

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НАНОДИФРАКЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ НАНОАЛМАЗОВ В ЛУКОВИЧНООБРАЗНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ

В.А.Попов¹⁾, И.И.Ходос²⁾, А.В.Егоров³⁾, С.В.Савилов³⁾, В.В.Лунин³⁾

¹⁾ НИТУ «МИСиС», Москва

²⁾ ИППТМ РАН, Черноголовка Московской обл.

³⁾ Московский государственный университет им М.В.Ломоносова, Москва

Для изучения процессов трансформации в отдельной алмазной наночастице применили просвечивающую электронную микроскопию ультра-высокого разрешения и метод нанодифракции. На картинах нанодифракции от исходных наноалмазов присутствуют отдельные рефлексы, соответствующие одной или нескольким кристаллографическим зонам, то есть наночастицы или монокристаллические, или состоят из нескольких блоков. Картины нанодифракции от луковичнообразных углеродных наночастиц, полученных отжигом при температурах выше 1600 °С, состоят из уширенных колец, соответствующих графиту. Отдельных рефлексов не наблюдается. Это говорит о полной трансформации наночастицы. В промежуточном состоянии, например, после отжига при 1000 °С, на поверхности агломератов наноалмазов можно наблюдать три типа наночастиц: 1) алмазные наночастицы, имеющие вид, аналогичный исходному состоянию, 2) луковичнообразные частицы, подвергнувшиеся полной трансформации, и 3) наночастицы, которые трудно идентифицировать ввиду очень слабого контраста. Картины нанодифракции от наночастиц, которые не поддаются идентификации методом прямого разрешения кристаллической решетки в просвечивающем электронном микроскопе, представляют собой множество отдельных рефлексов, заполняющих с некоторой плотностью дифракционные кольца, соответствующие алмазу. Это говорит о том, что произошло разбиение монокристаллической структуры на многочисленные фрагменты чрезвычайно малых размеров. Именно поэтому не происходит разрешения кристаллической решетки и вид наночастицы напоминает аморфное состояние.

Попов Владимир Алексеевич, к.т.н.
119049 Москва, Ленинский проспект, 4
Тел.: 8(903)7735200, E-mail: popov58@inbox.ru

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ZnO В Si, ИМПЛАНТИРОВАННОМ ИОНАМИ Zn и O

В.В.Привезенцев¹⁾, В.С. Куликаускас²⁾, В.В. Затекин²⁾, Д.В. Петров²⁾, П.Н. Черных²⁾, А.А. Шемухин²⁾, Н.В. Алов³⁾

¹⁾ *Физико-технологический институт РАН, Москва*

²⁾ *НИИЯФ им. Д.В. Скобельцина, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

³⁾ *Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

В последнее время широко исследуются свойства наночастиц (НЧ) окислов металлов в различных матрицах, поскольку такие материалы могут быть использованы в быстродействующих устройствах оптоэлектроники. Представлены результаты исследования процесса формирования НЧ ZnO в кремнии, ионно-легированном Zn и O.

Пластины Cz-n-Si(100) были имплантированы с дозой $D=2 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ ионами $^{64}\text{Zn}^+$ с энергией $E=100 \text{ кэВ}$, а затем ионами O с энергией $E=35 \text{ кэВ}$. После этого пластины были изохронно в течение 60 мин последовательно отожжены в O_2 при $t=400^\circ\text{C}$, 600°C и 800°C .

Радиационные дефекты в Si и профили имплантов Zn и O исследовались методом резерфордского обратного рассеяния ионов He^+ с энергией 2 МэВ. Проведено сравнение экспериментальных и рассчитанных по программам SRIM и TRIDYN профилей имплантов Zn и O. Фазовый анализ имплантированного слоя определялся методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Топография образцов была исследована в помощью сканирующего туннельного микроскопа Solver P47 (NT-MDT) в режиме атомно-силовой микроскопии (АСМ). Также использовался растровый электронный микроскоп LYRA 3 (TESCAN) в сочетании с рентгеновским энерго-дисперсионным микроанализом.

Полученные результаты указывают на формирование в легированном слое сразу после имплантации НЧ металлического Zn с размером порядка 10 нм. В процессе отжига размеры НЧ и фазовый состав имплантированного слоя изменились: фаза металлического Zn исчезла и появились фазы оксида цинка ZnO, а также его соединений ZnSiO_3 и Zn_2SiO_4 .

Привезенцев Владимир Владимирович, с. н. с., доц.

117218, Москва, Нахимовский просп., д.34

Тел.: 8(499)1296095; Факс: 8(499)1293141; E-mail: privezentsev@ftian.ru; v.privezentsev@mail.ru

ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Е.П.Прокопьев¹⁾, В.И.Графутин¹⁾, В.К.Неволин²⁾, С.П.Тимошенков²⁾, Ю.В.Фунтиков¹⁾

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной физики*

им. А.И. Алиханова, Москва

²⁾ *Московский государственный институт электронной техники, Москва*

Установлено (см., например, [1]), что метод позитронной аннигиляционной спектроскопии (ПАС) является наиболее чувствительным и надежным в целях исследований свободных объемов ангстремных и нанометровых размеров в дефектных твердых телах и пористых системах (металлах, полупроводниках и ионных кристаллах) и нанокристаллических компактированных материалах, применяемых во многих отраслях промышленности и особенно в нано- и микроэлектронике. В данной работе методом ПАС исследовались образцы тонкоизмельченного порошкообразного (1) и спрессованного графита особой чистоты (2), а также синтезированные в специальных условиях углеродистые образцы-прекурсоры (3), из которых извлекаются нанотрубки. Установлено, что в образцах (1) и (2) аннигиляция позитронов в основном происходит на электронах двумерного электронного газа, в то время как в образце (3) позитроны, по-видимому, аннигилируют будучи захваченными в свободные объемы и интерфейсы (см., [1-6]). Наблюдается небольшой пик гауссианы, соответствующий локализованному парапозитронию. Эти результаты соответствуют общепринятому электронному строению образцов графита (1) и (2) с металлической проводимостью и распыленному до атомных размеров зернистого углеродного материала (3). Исследования в этом направлении предполагается продолжить.

1. В.И.Графутин, Е.П.Прокопьев, Ю.В.Фунтиков. Развитие методов позитронной аннигиляционной спектроскопии для определения размеров нанообъектов в пористых системах, дефектных материалах и наноматериалах [Physics-Online.ru/](http://www.physics-online.ru/) Обсуждение современных проблем в мире физики/ Блог. Прокопьев Евгений Петрович. Рубрика: Химическая физика, физическая химия и материаловедение http://www.physics-online.ru/php/paper.phtml?jrnid=null&paperid=8127&option_lang=rus

Прокопьев Евгений Петрович, снс

117218, Москва, ул.Б.Черемушкинская, д.25

Тел.: 8(499)7311104; Факс: 8(499)9308768; E-mail: eprokopiev@mail.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МОДИФИКАЦИИ МЕТАМОРФНОГО БУФЕРА НА
ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА НЕМТ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР
НА ПОДЛОЖКЕ GaAs (1 0 0)**

О. А. Рубан^{1) 2)}, С. С. Пушкарёв^{1) 2)}, И. С. Васильевский²⁾, Г. Б. Галиев¹⁾,
Р.М. Имамов^{1) 3)}, Е. А. Климов¹⁾, И. А. Субботин³⁾, Е. И. Суворова³⁾

¹⁾ *Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН, Москва*

²⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

³⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

HEMT наногетероструктуры на подложках InP сегодня являются базовым материалом СВЧ электроники на частоты выше 100 ГГц. Технологически более привлекательны альтернативные им метаморфные наногетероструктуры на подложках GaAs с содержанием InAs в квантовой яме от 52% и выше.

В данной работе представлены результаты исследований структурных и электрофизических характеристик HEMT наногетероструктур $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$, выращенных методом МЛЭ на подложках GaAs с использованием метаморфного буфера (ММБ) трёх разных конструкций. Исходной являлась структура с ММБ $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ толщиной 1.08 мкм с плавным линейным увеличением x по толщине с инверсной ступенью в конце. В следующих образцах ММБ был модифицирован путём: а) увеличения его толщины (до 1.50 мкм); б) введением внутрь ММБ двух напряжённых сверхрешёток $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$; в) введением внутрь ММБ двух дополнительных инверсных ступеней (ИС) с последующими залечивающими слоями. Подвижность и концентрация электронов измерялись методом Ван дер Пау при температурах 300 К и 77 К. Структурные характеристики выращенных образцов исследовались методами рентгеновской дифракции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии. Показано, что наиболее высокое качество наногетероструктур обеспечивается введением внутрь ММБ сверхрешёток, являющихся геттерами для прорастающих дислокаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 21, проекта ФЦП "Кадры" №НК-616П(39) и гранта РФФИ (11-07-00050).

Пушкарёв Сергей Сергеевич, инженер-исследователь
117105, Москва, Нагорный проезд, д.7, стр. 5
Тел.: (916)8239722; Факс: (499)1236222; E-mail: s_s_e_r_p@mail.ru

**ЭФФЕКТ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
СУПЕРТОНКОГО БАЗАЛЬНОГО ВОЛОКНА ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ
СОЛЯНОЙ ИЛИ СЕРНОЙ КИСЛОТОЙ**

А.А. Саакян¹⁾, С.К. Никогосян¹⁾, В.Б. Гавалян¹⁾, В.В. Арутюнян¹⁾, Г.Н. Ерицян¹⁾,
А.С. Оганесян¹⁾, М. Герчиков²⁾

¹⁾ Национальная Научная Лаборатория им. Алиханяна, Ереван, Армения

²⁾ Nuclear Safety Solutions Limited, MSG1X6, Canada

Исследовано влияние обработки растворами соляной (HCl) или серной (H₂SO₄) кислоты на электрофизические параметры супертонкого ($d < 10$ мкм) базальтового волокна (СБВ) в зависимости от плотности упаковки D . Измерены диэлектрические параметры $\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon''$ на частоте 1кГц и удельное сопротивление по переменному ρ_{ac} и постоянному ρ_{dc} току при значениях плотности упаковки D от 0,5 до 1,1 г/см³ СБВ до и после обработки кислотными растворами при комнатной температуре.

Найдено, что параметр ε' необработанного СБВ с увеличением D изменяется незначительно, однако наблюдается сильный немонотонный рост диэлектрических потерь ε'' и немонотонное уменьшение удельного сопротивления при переменном токе ρ_{ac} . Для обработанных кислотами СБВ эти параметры сильно изменяются: наблюдается увеличение параметра ε' в 2-3 раза и рост ε'' на два порядка после обработки обеими кислотами. При этом ρ_{ac} уменьшается почти на два порядка. С увеличением плотности упаковки D в СБВ наблюдается значительный рост диэлектрических параметров и одновременное уменьшение ρ_{ac} . В то же время влияние обеих кислот на эти параметры качественно одинаково. Удельное сопротивление СБВ при постоянном токе ρ_{dc} после обработки уменьшается и в зависимости от плотности упаковки наблюдается немонотонное уменьшение ρ_{dc} с ростом D .

Обсуждаются возможные причины изменения электрофизических параметров СБВ в зависимости от плотности упаковки после кислотных обработок.

Саакян Арам Артаваздович, к.ф.м.н., ведущий научный сотрудник
375036, ул. братьев Алиханян, дом 2, Ереван, Армения
Тел: +374 10 34-44-88; Факс: +374 10 34-47-36; E-mail: asahak@mail.yerphi.am

ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В ЭЛЕКТРОННОМ СПЕКТРЕ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ ОТ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ

С.С.Савинский²⁾, М.Ж.Мажид¹⁾, Ю.С.Поздеева²⁾

¹⁾University of Basrah /IRAQ-Basrah

²⁾Удмуртский государственный университет (Россия, г.Ижевск)

В докладе рассматривается возможность изменения электронного спектра однослойной углеродной нанотрубки при упругой деформации и относительном сдвиге атомных подрешеток (реконструкции). Причиной изменения электронного спектра в рассматриваемой ситуации является нарушение ближнего атомного порядка. Геометрически углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания полосы на графитовой плоскости — графене с последующим «склеиванием» противоположных сторон полосы. Для графена сдвиг атомных подрешеток может быть реализован вдоль нормали либо в касательном направлении плоскости. Соответственно для атомных подрешеток углеродной нанотрубки может быть реализован продольный сдвиг, поворот либо сдвиг приводящий к гофрировке поверхности.

Для исследования электронного спектра углеродной нанотрубки при атомной деформации нами используется гамильтониан π -электронов в приближении сильной связи, матричные элементы которого в базисе атомных функций определяют амплитуды перехода электрона между атомами. В докладе представлены численные данные зависимости ширины запрещенной щели углеродных нанотрубок с различными индексами хиральности от величины деформации для случая упругого растяжения-сжатия и кручения нанотрубки, также данные зависимости энергетической щели углеродных нанотрубок в зависимости от угла разворота и сдвига подрешеток друг относительно друга на поверхности трубки.

Савинский Сергей Степанович

426034, Ижевск, ул.Университетская, 1

Тел.: (3412)685937; Факс (3412)684649; E-mail: savinsky@uni.udm.ru

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КУМУЛЯНТНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ОТРАЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН ОТ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ДВУХ СРЕД

С.В. Салихов¹⁾, Ф.Н. Чуховский²⁾, А.М. Поляков¹⁾

¹⁾ НИТУ «МИСиС», Москва

²⁾ Институт кристаллографии РАН, Москва

Решение задачи отражения волн от границы раздела сред дает возможность физически достоверных расчетов рефлектометрических кривых при заданных характеристиках многослойной структуры, которые могут быть положены в основу решения обратной задачи восстановления характеристик многослойных структур. Известные из литературы результаты сводятся к перенормировке выражения для коэффициента отражения от идеально-гладкой поверхности. Расчет коэффициента отражения представляет определенные трудности в общем случае произвольных высот и длин корреляции шероховатости поверхности.

В работе для вычисления амплитуды волнового поля используется метод функций Грина в рамках формализма Гюйгенса-Френеля и проведено усреднение точных выражений для коэффициентов отражения и прохождения. Вследствие многократного рассеяния, усредненные коэффициенты представляют собой разложения в ряд по многоточечным кумулянтным средним. Развита диаграммная техника (см., например, [1]), позволившая провести оценку многоточечных кумулянтных средних и расчет когерентных коэффициентов отражения и прохождения в зависимости от высоты и длины корреляции шероховатостей поверхности.

Полученные выражения могут быть использованы для исследования поверхностей раздела двух сред в широком диапазоне изменения высот и корреляционных длин шероховатостей. В предельных случаях больших корреляционных длин и малых высот шероховатостей полученные выражения переходят в выражения, известные в литературе.

1. Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику. Часть II. Случайные поля. М.: Наука, 1978, 464с.

Салихов Сергей Владимирович
119049, Москва, Ленинский пр., д. 4
Тел.: (495)6384533; Факс: (495)2362105; E-mail: Salikhov@misis.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ АСПЕКТОВ КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В СИЛИКАТНЫХ СТЕКЛАХ ПРИ ДОПИРОВАНИИ ОКСИДАМИ ЦЕРИЯ И ТИТАНА

С.А. Самойленко^{1),2)}, С.Е. Кичанов¹⁾, А.В. Белушкин¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, Б.Н.Савенко¹⁾
Л.А. Булавин²⁾, В.М. Гарамус³⁾, Г.П. Шевченко⁴⁾, В.С.Гурин⁴⁾

¹⁾Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия

²⁾ Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³⁾ Helmholtz-Zentrum Geesthacht, D-21502, Geesthacht, Германия

⁴⁾ Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ,
220080, Минск, Беларусь

Одной из актуальных задач современной физики конденсированных сред является поиск новых оптических материалов с возможностями гибкого управления их оптическими характеристиками за счет вариации химического состава. Перспективными материалами являются силикатные стекла, допированные оксидами титана и церия, они характеризуются высокой температурной стабильностью и устойчивостью к жесткому ультрафиолетовому излучению.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы структурные аспекты формирования Ti-Ce-O кластеров в силикатных стеклах при допировании оксидами TiO₂ и CeO₂. При увеличении концентрации исходных оксидов наблюдается рост среднего размера кластеров от 330 до 370 Å. Обсуждается взаимосвязь между структурными характеристиками кластеров и оптическими свойствами допированных силикатных стекол.

Работа поддержана грантом БРФФИ-ОИЯИ №Х10Д-007, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Самойленко Сергей Александрович
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6
Тел.: 8(49621)63899; Факс: 8(49621)65882, E-mail: samoilenko_pp@mail.ru

ФОТОЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И МИКРОСКОПИЯ ГОМОСТРУКТУР n-, p-GaAs(110)

Н.Ю. Свечников

НИЦ Курчатовский институт, Москва

Полупроводники класса III-V со структурой цинковой обманки дают почти совершенные и атомарно чистые поверхности скола (110), ввиду их зарядовой нейтральности, которые используются как зеркальные плоскости оптических резонаторов в лазерных диодах. В результате измерений фотоэлектронных спектров остоного уровня Ga3d после скола *in situ* по плоскости (110) легированных полупроводников p-GaAs и n-GaAs для 28 сколов, которые выглядели зеркально плоскими под оптическим микроскопом, были получены оценки положения уровня Ферми $E_F(p)$, $E_F(n)$ для p- и n- слоев. Исследовалось также двумерное фотоэмиссионное изображение p-n перехода и областей скола p- и n- с использованием сфокусированного пучка СИ (\varnothing 0.7 мк, 95 эВ, $\sim 10^{10}$ фот./с) на сканирующем фотоэмиссионном микроскопе на Станции "Spectromicroscopy beamline" (ELETTRA, Триест, Италия). Полученный усредненный изгиб зон p- слоя относительно положения плоских зон составил 0.12 ± 0.05 эВ (отклонение от расчетного $E_F(p)$ вверх от уровня Ферми для плоских зон), а изгиб зон n- слоя относительно плоских зон составил 0.16 ± 0.08 эВ (отклонение от расчетного $E_F(n)$ вниз от уровня плоских зон), при разрешении спектрометра < 0.15 эВ. Выполнен детальный анализ экспериментальных результатов по выяснению отличия от ситуации объемных плоских зон, характерных для отсутствия поверхностных дефектов скола. Проведено сопоставление с известными литературными данными по теоретическому и экспериментальному исследованию дефектов скола (110). Также показано, что причиной сдвига линии Ga3d в ситуации плоских зон не могут быть известные побочные фотостимулированные эффекты. Результаты экспериментов, приводящие к разной степени отличия от условия объемных плоских зон для каждого скола, объясняются локальными микроскопическими внешними дефектами скола, которые могут появляться случайно и непредсказуемо, поскольку скол является нелинейным процессом многих тел и многих степеней свободы.

Свечников Николай Юрьевич, зам. нач. лаб., с.н.с.
129626, Москва, Рижский проезд, д.11, кв.9.
Тел.: (499)1969017; Факс: (499)1967723; E-mail: svech1@km.ru

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СОСТОЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ, ОБЛУЧЕННЫХ ПРОТОНАМИ, ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

И.С.Смирнов, И.Г.Дьячкова, Е.Г.Новоселова

Московский государственный институт электроники и математики (ТУ), Москва

В работе было изучено распределение интенсивности диффузного рассеяния в окрестности узлов обратной решетки кристалла кремния, облученного протонами с энергией (100+200+300) КэВ и дозой $2 \cdot 10^{16} \text{см}^{-2}$, в зависимости от режима термической обработки в диапазоне от 200 до 1100°C. Показано, что непосредственно после облучения формируется нарушенный слой с увеличенным параметром решетки, состоящий из слабо ассоциированных радиационных дефектов междоузельного типа. В ходе термообработки происходит укрупнение дефектов. При 300°C установлено присутствие двух видов дефектов с разными мощностями. Преобладающим типом микродефектов являются дефекты с отрицательным знаком дилатации. При повышении температуры отжига до 500°C резко возрастает мощность микродефектов обоих типов, заметный вклад в рассеяние вносят дефекты вакансионного типа в виде скопления мелких пор размером 50-75 нм. Основными дефектами междоузельного типа являются дислокационные петли, расположенные в наклонных и {110} со средним радиусом 0,1 мкм. При увеличении температуры отжига до 1100°C процесс выхода водорода завершается схлопыванием крупных пор с формированием областей, насыщенных мелкими порами и междоузельными дислокационными петлями, которые обуславливают сильно разупорядоченную структуру нарушенного слоя.

Возможности практического применения нарушенных слоев, формируемых облучением ионами водорода и последующим термическим отжигом, показаны на примере улучшения характеристик кремниевых рpn-фотодиодов.

Смирнов Игорь Сергеевич, профессор
109028, Москва, Б.Трехсвятительский пер., д.3
Тел.: 8(499)2351141; E-mail: met@miem.edu.ru

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ ЭЛЕКТРОНОВ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ШЕСТИ ФАЗ ПОЛИМЕРИЗОВАННОГО ФУЛЛЕРИТА, ФУЛЛЕРИТА И ФУЛЛЕРЕНА

В.В. Соболев, В.Вал. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

В работе [1] измерены в области 0-35 эВ спектры характеристических потерь энергий электронов монокристаллов, моно-, димера, 1D- и 2D- C₆₀ для образцов с диаметрами 180 нм, состоящих из кластеров с диаметром в несколько десятков нм. Спектры поглощения в области 1-5 эВ известны для фуллеренов (отдельных молекул) в газах и растворах. Наиболее полную информацию об оптических свойствах и электронной структуре содержит комплекс оптических фундаментальных функций [2]: мнимая (ε_2) и реальная (ε_1) части диэлектрической проницаемости; реальные ($\text{Re}\varepsilon^{-1}$, $\text{Re}(1+\varepsilon)^{-1}$) и мнимые ($-\text{Im}\varepsilon^{-1}$, $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$) части потерь энергии электронов. Цель настоящего сообщения – определить спектры комплексов оптических функций четырех твердотельных фаз C₆₀, сопоставить их со спектрами молекул C₆₀ в газе и растворах, установить их основные параметры и особенности. Расчеты спектра полных комплексов оптических функций моно-, димера-, 1D- и 2D- C₆₀ выполнены в области 0-35 эВ на основе экспериментальных спектров $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ [1] с помощью пакета компьютерных программ, ранее описанных и опробованных [2]. В результате расчетов были установлены основные особенности и параметры четырех комплексов оптических спектров фуллеритов в широкой области энергии фундаментального поглощения 0-35 эВ, в том числе энергии объемных и поверхностных плазмонов, экситонных и междузонных переходов, параметры полос переходов. Большое детальное сходство спектров четырех фаз фуллеритов и двух фаз фуллеренов свидетельствует о большой консервативности молекулы C₆₀ и природе полос переходов по модели экситонов малого радиуса.

1. Terauchi M., Nishemura S., Jwasa Y.J. Elect. Spectroscopy and Rel. Phen. 143, 167 (2005).

2. Kalugin A.I., Sobolev V.V. Phys. Rev. B. 71, 115112 (2005).

Соболев Валентин Викторович, профессор
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИЙ ЭЛЕКТРОНОВ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ РАЗНЫХ ПЕРЕДАННЫХ ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРОВ И ИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ

В.Вал. Соболев, В.В. Соболев, Е.А. Антонов

Удмуртский государственный университет, Ижевск

При прохождении пучка быстрых электронов с волновым вектором \mathbf{q} через пленку образца возбуждаются прямые ($|\mathbf{q}|=0$) или только не прямые ($|\mathbf{q}|>0$) междузонные переходы, которые по интенсивности отличаются слабо. Возбуждаемые быстрыми электронами не прямые переходы принципиально различаются от очень слабых не прямых переходов, создаваемых светом [1].

При последовательном увеличении переданного волнового вектора $|\mathbf{q}|>0$ происходят междузонные не прямые переходы из валентных зон в одних точках зоны Бриллюэна в зоны проводимости других точек зоны Бриллюэна. Исследование спектров $-\text{Im}\varepsilon^{-1}(\mathbf{E}, \mathbf{q})$ предоставляет новый экспериментальный метод зондирования зон проводимости, который содержит принципиально новую и, возможно, существенно более богатую информацию о дисперсии зон проводимости, чем это удастся получить при возбуждении переходов светом.

В работе [2] измерены спектры $-\text{Im}\varepsilon^{-1}(\mathbf{E}, \mathbf{q})$ однослойных углеродных нанотрубок для девяти значений $|\mathbf{q}|=(0.1\div 0.6)\text{Å}^{-1}$ в области 0.5-9 эВ. На их основе нами рассчитаны спектры комплексов квазиоптических фундаментальных функций (R , ε_1 , ε_2 , n , k , σ и др.). Установлены их основные особенности и зависимости от значений $|\mathbf{q}|$. Расчеты выполнены с применением компьютерных программ, разработанных на основе интегральных соотношений Крамерса-Кронига и аналитических формул связи между оптическими функциями.

1. Pichler et al. Phys.Rev.Lett. 80, 4729 (1998).

2. Соболев В.В., Немощкаленко В.В. Электронная структура полупроводников. (Киев: Наук. Думка) 423 с. (1988). (2004).

Соболев Валентин Валентинович, профессор
426034, Ижевск, ул. Университетская, д.1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАТОНКИХ НАНОПЛАСТИН $Gd_2O_3:Eu$

М.Н.Соколов, А.С.Ванецев, О.М.Гайтко, И.Г.Чувашова

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

В последнее время появилось много исследований, посвященных возможностям использования наночастиц оксидов редкоземельных элементов, обладающих люминесцентными свойствами, в медицине, оптических устройствах высокого разрешения и при создании высокоэффективных источников света нового поколения.

В настоящей работе предложен новый метод сольвотермального синтеза коллоидных растворов наночастиц $Gd_2O_3:Eu$, основанный на сольволизе солей гадолиния и европия в высококипящих растворителях в присутствии ПАВ (олеиламин, олеиновая кислота) при высоких (250–300°C) температурах.

Поскольку полученные наночастицы покрыты слоем ПАВ и нерастворимы в полярных жидкостях, для их осаждения и редиспергирования использовали, соответственно, ацетон и гептан. Формирование наночастиц $Gd_2O_3:Eu$ наблюдалось в диапазоне температур 250–300°C. При более низких температурах сольволиза не происходило исходных соединений, а при температурах 300°C и выше наблюдалось быстрое выпадение крупных (>300 нм) частиц оксида гадолиния. данные просвечивающей электронной микроскопии свидетельствуют о том, что полученные коллоидные растворы характеризуются наличием тонких пластин шириной 10-15 нм и толщиной не превышающей 1.5 нм. При этом увеличение температуры синтеза в указанном диапазоне (250–300°C) приводит к уменьшению среднего размера формирующихся частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (№ 09-03-01067-а и 10-02-91167-ГФЕН_а), а также гранта Президента Российской Федерации для поддержки российских молодых ученых (МК-2607.2011.3).

Соколов Михаил Николаевич

119991, Москва, Ленинский пр-кт, д.31

Тел.: 8(495)6338503; Факс: 8(495)9541279; E-mail: falconhunt@mail.ru

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИСАДОК НА ПРОЦЕСС ТРЕНИЯ КОЛЁСНОЙ СТАЛИ

М.А.Солдатов¹⁾, А.А.Гуда¹⁾, В.Л.Мазалова¹⁾, А.В.Солдатов¹⁾,
Н.А.Мясникова²⁾, В.И.Колесников²⁾,

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону

На стенде для трибологических испытаний, моделирующем трение качения подшипник-диск, были проведены испытания трения диска из колёсной стали в смазке ПУМА-МЛ с добавлением присадок. Полученные образцы – различные участки поверхности диска колёсной стали после 10 часов испытаний – исследовались с помощью спектроскопии рентгеновского поглощения XANES на российско-немецкой линии RGBL синхротрона BESSY-II. В качестве присадок к стандартной смазке ПУМА-МЛ использовались наночастицы оксида меди, марганца и железа в объёмном количестве ~ 2-5%. Для измерений образцы помещались в камеру с высоким вакуумом на медный держатель и облучались интенсивным пучком синхротронного излучения (размер пучка 50x100 мкм²). Измерялся полный ток утечки с поверхности образца. В результате были получены спектры поглощения XANES за К-краями углерода и кислорода, а также за L_{2,3} краями железа, хрома, марганца и меди. Хотя глубина проникновения рентгеновского излучения в образец была порядка микрометра, метод регистрации полного тока утечки ограничивал глубину формирования сигнала XANES 5-10 нанометрами.

Кратко отметим некоторые интересные результаты: после испытаний наблюдается рост концентрации оксида Fe₂O₃ на поверхности стали; в присадки марганец входит в виде наночастиц MnO₂, в то время как после испытаний на поверхности стали марганец присутствует преимущественно в виде оксида MnO; концентрация хрома на поверхности стали после трения в смазках с присадками выше, чем после трения в чистой смазке, хотя хром не входит в состав присадок.

Солдатов Михаил Александрович, аспирант

344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5

Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2901003; E-mail: mikhail.soldatov@gmail.com

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОТОВОССТАНОВЛЕНИЯ МЕДИ (II) В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИКА

Е.И. Степановских¹⁾, Т.А. Алексеева^{1),2)}, Л.А. Брусницына^{1),2)}

¹⁾ *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*

²⁾ *Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России, Екатеринбург*

Изучение механизма процесса фотовосстановления меди (II) в твердой матрице на поверхности диэлектрического материала в многокомпонентной системе является сложной задачей. Первый шаг в решении этой задачи заключается в выявлении кинетических закономерностей фотоактивации диэлектриков, что позволит дать феноменологическое описание процесса фотовосстановления меди в форме кинетических уравнений.

Для обработки массива экспериментальных данных было предложено две модели, объясняющие процесс фотоактивации диэлектрических материалов.

Согласно первой модели реакция восстановления меди (II) в сухом слое фотокомпозиции может быть отнесена к гомогенной, т.е. элементарный акт реакции локализован в любой точке объема фоточувствительной композиции. С увеличением времени экспонирования величина константа скорости фотохимической реакции систематически уменьшается, поскольку она зависит и от интенсивности падающего света, а последняя с течением времени уменьшается.

По второй модели реакция фотовосстановления меди (II) рассматривается как типичная топохимическая реакция. Процесс восстановления меди (II) локализован вблизи фронта реакции, который движется вглубь исследуемой композиции. Обработка экспериментальных точек позволяет легко определить эффективную константу скорости фотохимической реакции. Это свидетельствует об адекватности предложенной модели для использования ее в проектировании технологических процессов экспонирования фоточувствительных композиций.

Степановских Елена Ивановна, доцент, к.х.н.
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19
Тел.: (343)3754445; E-mail: Estepa1@yandex.ru

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ВЫРАЩИВАЕМЫХ НА КРИСТАЛЛАХ (001)SrTiO₃ СЛОИСТЫХ НАНОСИСТЕМ В ВИДЕ СВЕРХРЕШЕТОК (La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃/SrRuO₃)x10

Е.А.Степанцов

Институт кристаллографии РАН, Москва

Методом рентгеновской дифрактометрии изучена структура тонкопленочной слоистой наносистемы {La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃/SrRuO₃}x10 из ферромагнитных оксидных материалов типа d3 и d4 соответственно, выращенной на подложке SrTiO₃ ориентации (100). Работа выполнена в рамках направления создания элементной базы оксидной спинтроники. Рост осуществлялся эпитаксиально, методом лазерного импульсного осаждения поочередно, в одном процессе материалов La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃ и SrRuO₃. В каждой пленке напыление данной пары повторялось 10 раз. Толщина каждого слоя составляла по 2,2 нм, что эквивалентно четырем элементарным ячейкам.

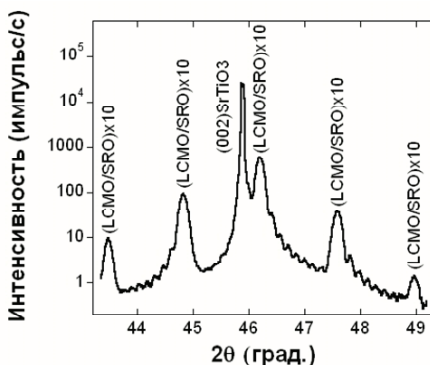


Рис.1. Кривая рентгеновского зеркального отражения от тонкой пленки {La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃/SrRuO₃}x10, выращенной на подложке SrTiO₃ ориентации (100) методом лазерного импульсного осаждения.

Полученные пленки продиагностированы методом рентгеновского зеркального отражения. Показано, что они эпитаксиальные. Пики посторонних фаз и кристаллографических ориентаций на рентгеновских кривых полностью отсутствуют. На рис.1, в качестве примера, на одной из таких кривых детально продемонстрирована окрестность пика подложки (002). Помимо небольших пиков толщинных биений, по обе стороны от центрального пика пленки на угловом расстоянии, кратном 1,38°, отчетливо проявляются пять крупных пиков, обусловленных рентгеновской дифракцией на сверхрешетке.

Степанцов Евгений Аркадиевич

119333, Москва, Ленинский просп., 59, Институт кристаллографии РАН

Тел.: 8(495)3308274; E-mail: stepantsov@ns.crys.ras.ru

НАСЛЕДОВАНИЕ ТЕКСТУРЫ ПОДЛОЖКИ ТИПА RABITS В БУФЕРНЫХ СЛОЯХ ДЛЯ ВТСП ПРОВОДОВ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ

А.М.Строев¹, И.А.Черных¹, М.Л.Занавескин¹, А.Н.Марченков¹
В.В.Клечковская², А.С.Орехов²

1) НИЦ «Курчатовский институт», Москва

2) Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН

ВТСП провода второго поколения, являются на сегодняшний день самым перспективным направлением развития технической сверхпроводимости и представляют огромный интерес для электротехники и электроэнергетики. Основное фундаментальное преимущество ВТСП проводов 2-го поколения перед первым поколением заключается в том, что благодаря наличию преимущественной ориентации кристаллитов сверхпроводящей фазы они обладают большей плотностью критического тока.

В качестве подложек для ВТСП 2-го поколения в нашей работе использовались текстурированные металлические ленты типа RABiTS с остротой текстуры $6\text{-}8^0$. Выбрана трехслойная архитектура буферных слоев $Y_2O_3/YSZ/CeO_2$ для последующего роста ВТСП слоя. Такая архитектура позволяет добиться согласования параметров кристаллических решеток слоев, необходимого для эпитаксиального роста, содержит барьерный слой, препятствующий диффузии молекул от подложки к ВТСП слою и обратно и обеспечивает передачу текстуры от подложки к ВТСП слою. Нанесение буферных слоев осуществлялось методом импульсного лазерного напыления. Целью данной работы определение условий напыления пленочных покрытий, при которых происходит наследование остроты текстуры и преимущественное образование необходимой кристаллографической ориентации в буферных слоях. Контроль структуры буферных слоев проводился с применением методик рентгеновской дифракции и дифракции обратно отраженных электронов. Было получено соотношение необходимой ориентации буферных слоев к паразитной более 90%. При этом острота текстуры буферных пленок была не хуже остроты текстуры подложек и составляла $6\text{-}8^0$.

Алексей Митрофанович Строев, инженер-исследователь
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1
Тел.: (499)196784; E-mail:patriot-spqr@yandex.ru

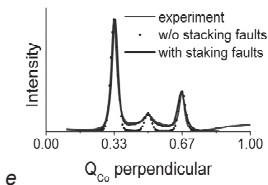
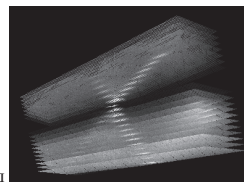
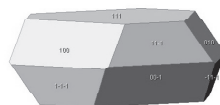
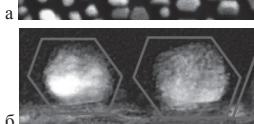
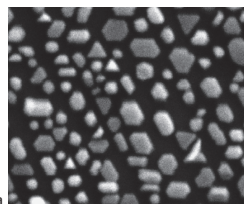
ТРЕХМЕРНОЕ КАРТОГРОФИРОВАНИЕ РЕФЛЕКСОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ НАНООСТРОВКОВ КОБАЛЬТА

С.М. Сутурин, В.В. Федоров, А.М. Коровин, А.А. Ситникова,
А.В. Нащекин, Н.С. Соколов

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

Исследования самоорганизующихся массивов магнитных частиц в последнее время вызывает все больший интерес в связи с возрастающими потребностями к разработке магнитных носителей сверхвысокой плотности. В настоящей работе исследовались наноразмерные частицы кобальта (рис. а), выращенные эпитаксиально на поверхности $\text{CaF}_2(111)$. В работе продемонстрирована возможность управлять размерами частиц (от единиц до десятков нм), задавать их плотность и создавать цепочки частиц вдоль ступеней CaF_2 .

С помощью сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии показано, что островки имеют форму многогранников (рис. б, в), ограниченных гранями $\{111\}$ и $\{100\}$. Из картин дифракции быстрых электронов (ДБЭ) следует (рис. г), что решетка Co имеет ГЦК решетку, ориентированную параллельно решетке CaF_2 . Наличие тяжелой и необычное раздвоение рефлексов на картинах ДБЭ свидетельствует о нетривиальном распределении интенсивности в рефлексах кобальта. Для построения 3D карты обратного пространства был разработан оригинальный метод комбинирования картин ДБЭ, измеренных с малым шагом по углу падения. Для проведения количественного анализа, также были измерены 3D карты интенсивности вблизи отдельных рефлексов с помощью поверхностно чувствительной рентгеновской дифракции на станции BL3A синхротрона Photon Factory (рис. д). Показано, что рефлекс асимметрично удлинен тяжами в направлениях $\{111\}$. Такое удлинение может быть вызвано фасетированием, напряжениями и наличием дефектов упаковки. Моделирование профиля интенсивности (рис. е) вдоль тяжа позволило оценить вклад каждого из факторов.



Сутурин Сергей Михайлович, с.н.с., к.ф.-м.н.
194021 С-Петербург, Политехническая 26, ФТИ РАН
Тел.: 8(812)2976411; E-mail: suturin@mail.ioffe.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ MORFOLOGИИ ПЛЕНOK SnSe METOДOM ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Н.А. Третьякова^{1,2)}, Т.А. Алексеева^{1,2)}

¹⁾ ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург

²⁾ ГОУ ВПО «Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС России», Екатеринбург

Работа посвящена изучению морфологии пленок селенида олова, полученных методом гидрохимического синтеза.

Для осаждения слоев SnSe использовалась реакционная смесь, приготовленная из водных растворов хлорида олова (II), цитрата натрия, гидроксида натрия, селеномочевины, сульфита натрия. Пленки осаждались при температуре 353 К в течение 120 мин. Добавка сульфита натрия в реакционной смеси выполняла роль антиоксиданта для селеномочевины, препятствующего ее окислению кислородом воздуха.

Электронно-микроскопические исследования пленок были выполнены с помощью растрового электронного микроскопа Scanning Electron Microscope JEOL JUS-5900 LV при ускоряющем напряжении 20 кВ. Съемка производилась в низковакуумном режиме, который позволяет исследовать образцы без напыления токопроводящего слоя.

На полученных микроэлектронных фотографиях пленок селенида олова, видно, что структура слоев относительно рыхлая. Пленка состоит из сросшихся микрокристаллитных образований, частицы которых имеют размеры 0,15–0,35 мкм, а форма кристаллитов не имеет выраженного габитуса.

Кроме того, синтезированные пленки SnSe были изучены методом лазерного микроанализа. Полученные данные позволили выявить нестехиометрию по селену, которая достигает 6,1 ат.%. Это говорит о возможном присутствии в слоях рентгеноаморфных фаз гидроксида и (или) цианомида олова, отличающихся малой растворимостью.

Третьякова Наталья Александровна, доцент
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 28, химико-технологический факультет, кафедра ХТТ и ПЭ
Тел.: (343)3754450; E-mail: n-tretyakova@mail.ru

СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКЛАСТЕРОВ CdS, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛЕНГМЮРА-БЛОДЖЕТТ

С.В. Трубина¹⁾, С.Б. Эренбург¹⁾, Л.Л. Свешникова²⁾, Т.А. Дуда²⁾, К.С. Журавлев²⁾,
С.Г. Никитенко³⁾

¹⁾ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск*

³⁾ *NOSR (NOW), DUBBLE at ESRF, Grenoble, France*

Исследование структуры и оптических свойств низкоразмерных полупроводниковых структур представляет значительный интерес в связи с возможностью их использования для создания новых оптоэлектронных устройств. Известно, что условия формирования полупроводниковых нанокластеров (НК) и их размеры оказывают существенное влияние на их структурные, оптические и электронные свойства. Для определения структурных параметров таких систем, содержащих НК CdS и не имеющих дальнего порядка, использован метод EXAFS спектроскопии.

Образцы получали по методу Ленгмюра-Блоджетт (ЛБ). В качестве подложек использовали полированные пластины кремния. EXAFS CdK спектры измерялись в режиме флуоресценции с использованием СИ накопительного кольца VEPP-3 ИЯФ СО РАН в Новосибирске (295 К) и канала DUBBLE центра ESRF в Гренобле (12 К).

Обнаружен эффект анизотропии формы нанокластеров CdS, образующихся в матрице пленки на первом этапе приготовления. Показано, что при увеличении температуры отжига межатомные расстояния Cd-S увеличиваются на $\sim 0,03 \text{ \AA}$, что может быть связано как с увеличением размера наночастиц, так и с изменением их микроструктуры. Установлена корреляция между увеличением межатомных расстояний и уменьшением энергии максимума полосы фотолюминесценции CdS при увеличении температуры отжига.

Трубина Светлана Владимировна, снс, к.ф-м.н.
Пр. Ак. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия, 630090.
Тел.: (383)3304447; Факс: (383)3309489; E-mail: svt@niic.nsc.ru

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЧАСТИЦ ЯДРО-ОБОЛОЧКА CaCO_3/Ag

Д.Б. Трушина^{1,2)}, Э.В. Штыкова¹⁾, В.В. Артемов¹⁾, Т.В. Букреева^{1,3)}

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Физический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, Москва*

³⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Поиск альтернативных источников энергии привел в прошлом веке к созданию солнечных батарей на основе фотоэлементов. Первые фотоэлементы не отличались высокой эффективностью, и к настоящему моменту их КПД составляет не более 40%. Одним из способов повысить КПД является производство фотоэлектрических элементов на основе новых материалов с улучшенными свойствами, например, перспективным является применение модифицированных частиц для покрытия рабочих поверхностей фотоэлементов.

Данная работа посвящена исследованию возможности использовать микросферолиты карбоната кальция в качестве основы новой системы – частиц ядро-оболочка карбоната кальция с серебром для дальнейшего создания фотоэлектрического элемента. Для этого проводили восстановление серебра на поверхности частиц CaCO_3 с помощью реакции «серебряного зеркала» и изучали морфологию поверхности методом электронной сканирующей микроскопии. Были выбраны условия, при которых на поверхности частиц образуется сплошная оболочка серебра.

Полученные образцы исследовали методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Экспериментальные кривые были обработаны с помощью программы Gnom, позволяющей оценить распределение объемных долей по размерам в полидисперсных средах. Кривые распределения пор по размерам в чистой матрице CaCO_3 и в матрице с серебром имеют максимумы на одних и тех же местах. Распределение неоднородностей в целом бимодальное с мелкими порами 2.0 – 3.0 нм и широким спектром крупных пор вплоть до 80 нм.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке НШ-65636.2010.2.

Трушина Дарья Борисовна
119333, Москва, Ленинский просп., 59, ИК РАН
Тел.: 8(499)1354020; Факс: 8(499)1351011; E-mail: trushina.d@mail.ru

**КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ УДЕЛЬНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СОПРОТИВЛЕНИЕМ И
МАГНИТНЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ В МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ
[(Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)₃₅(Al₂O₃)₆₅/a-Si:H]₃₆.**

В.А. Уклеев¹⁾, Е.А. Дядькина¹⁾, С.В. Григорьев¹⁾, D. Lott²⁾, О.В. Геращенко¹⁾,
А.В.Ситников³⁾, Ю.Е.Калинин³⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

²⁾ *Helmholtz-Zentrum, Geesthacht, Germany*

³⁾ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж*

В данной работе методом рефлектометрии поляризованных нейтронов исследовано магнитное упорядочение в аморфных многослойных наноструктурах [(Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)₃₅(Al₂O₃)₆₅/a-Si:H]₃₆ в зависимости от толщины (0,7; 1,1; 1,5; 2,3 и 2,8 нм) немагнитного полупроводникового (ПП) a-Si:H слоя. Интенсивность отраженного пучка измерялась при комнатной температуре для двух различных поляризаций падающих нейтронов: параллельной (+P₀) и антипараллельной (-P₀) приложенному в плоскости образца магнитному полю **H**, варьировавшемуся в диапазоне от 0 до 500 мТл. Средняя намагниченность индивидуального металл-диэлектрического (МД) (Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)₃₅(Al₂O₃)₆₅ слоя была получена из разности интенсивностей магнитных отражений $I(+P_0, Q_R)$ и $I(-P_0, Q_R)$. В индивидуальном МД слое четырех образцов с толщинами ПП слоя 0,7; 1,1; 2,3 и 2,8 нм возникает ферромагнитное упорядочение, причем намагниченность достигает насыщения при $H = 100 - 250$ мТ. Напротив, образец с толщиной ПП слоя 1,5 нм очень слабо намагничивается в полях $H = 0 - 500$ мТ. Дополнительные исследования транспортных свойств наноструктур продемонстрировали, что зависимость удельного электрического сопротивления от толщины полупроводникового слоя характеризуется минимумом, который соответствует образцу с толщиной ПП слоя 1,5 нм. Можно заключить, что удельное электрическое сопротивление и магнитное упорядочение в исследованных наноструктурах четко коррелируют. Механизм этой корреляции обсуждается.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-02-01231-а).

Уклеев Виктор Алексеевич

188300, Гатчина, Ленинградская обл., Орлова роща

Тел.: (81371)46185; Факс: (81371)39023; E-mail: ukleev@ins.pnpi.spb.ru

ГЕТЕРОНАНОСТРУКТУРЫ PbS/CdS

Н.А.Форостяная¹⁾, Л.Н.Маскаева¹⁾, В.И.Воронин²⁾, В.Ф.Марков¹⁾

¹⁾ *Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*

²⁾ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

Расширение круга функциональных материалов за счет формирования сложных структур, в частности, твердых растворов замещения является одним из наиболее перспективных направлений полупроводникового материаловедения.

Сульфид свинца, обладая наиболее высокой из известных веществ фоточувствительностью в ближней ИК – области спектра, потенциально может быть основой создания активных материалов для солнечной энергетики за счет формирования твердых растворов замещения в системах с более широкозонным халькогенидом – CdS. Вариации составов ТРЗ позволяют регулировать и оптимизировать диапазон спектральной чувствительности ИК материалов в достаточно широких пределах. Известно, что использование веществ, имеющих ограниченную взаимную растворимость, существенно повышает деградационную стойкость широкозонных фоторезисторов. Благодаря ограниченной растворимости CdS и PbS при определенных условиях образуется материал, условно обозначаемый CdS-PbS, который состоит из широкозонной матрицы, представляющей собой твердый раствор PbS в CdS, и узкозонных низкоомных включений – твердого раствора CdS в PbS. Содержание свинца в широкозонной матрице не превышает 2%.

В данной работе исследовался твердый раствор $Pb_xCd_{1-x}S$, полученный путем ионообменного замещения погружением пленки сульфида кадмия в комплексный раствор, содержащий соль свинца (II). В течении опыта варьировалось время его проведения (от 30 до 300 минут), температура синтеза (от 333 до 363 K) и содержание компонентов реакционной смеси. Полученные пленки изучались методами рентгенографии, растровой электронной и сканирующей туннельной микроскопии. Рентгеновский анализ проводили на модернизированном цифровом дифрактометре ДРОН в SuK_{α} - излучении в интервале углов 2θ от 5 до 70 градусов при шаге 0,03 градуса и временем накопления в точке 5 с. В работе установлено, что тонкие пленки твердые растворы замещения $Cd_{1-x}Pb_xS$ имеют кубическую структуру (типа NaCl, пространственная группа $F4\bar{3}m$), о чем свидетельствует монотонный рост параметра a элементарных ячеек с увеличением содержания свинца в составе твердого раствора. Электронно-микроскопические исследования планарной поверхности показали, что пленки твердых растворов $Cd_{1-x}Pb_xS$ обладают достаточной сплошностью и состоят из частиц по форме близких к сферическим. Было показано, что величина диффузии ионов свинца растет с увеличением температуры и продолжительности обменного процесса.

Форостяная Наталья Александровна
620092, Екатеринбург, ул. Сиреневый бульвар, д. 4, корп. 2
Тел.:(343)3485916; E-mail: natal-ku8@yandex.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ MORFOLOGИИ ПОВЕРХНОСТИ И ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ЭПОКСИСИЛОКСАНОВЫХ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ

Т.В.Хамова¹⁾, О.А.Шилова¹⁾, И.Ю.Кручинина¹⁾, Г.П.Копица²⁾, С.В.Григорьев²⁾,
Е.В. Яковенко³⁾, В.К.Иванов⁴⁾, К.Э.Пугачев¹⁾

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

²⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

³⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

⁴⁾ *Институт общей и неорганической химии РАН, Москва*

Настоящая работа посвящена исследованию структуры гибридных органо-неорганических нанокomпозиционных покрытий, формируемых на основе эпоксисилоксановых зольей, как модифицированных, так и немодифицированных наноалмазами детонационного синтеза (ДНА). Такие покрытия перспективны для защиты каменных памятников культурного наследия от биоразрушений микробными семействами, а также представляют интерес для придания металлическим конструкциям антифрикционных свойств.

Исследования морфологии поверхности покрытий проводили с привлечением методов атомной силовой микроскопии и сканирующей электронной микроскопии. Внутреннюю структуру покрытий на мезоскопическом масштабе анализировали методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей на образцах ксерогелей, синтезированных на основе описанных зольей. Измерения были проведены в диапазоне переданных импульсов $1 \cdot 10^{-3} < q < 1 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$.

Из комплексного анализа экспериментальных данных установлено, что для полученных эпоксисилоксановых покрытий характерно незначительное фазовое расслоение и, по-видимому, формирование структуры взаимопроникающих сеток. Процессы агрегации в кремнезолях в присутствии оксидной составляющей происходят с образованием сетчатой структуры по типу массового фрактала. Обнаружено, что введение в эпоксисилоксановые покрытия незначительных добавок ДНА позволяет повысить как фрактальную размерность, так и верхнюю границу самоподобия.

Работа выполнена при поддержке программы "СТАРТ-11" (проект 11-2-Н5.1-0177) и гранта РФФИ (проект 11-08-00287-а).

Хамова Тамара Владимировна

199034, Санкт-Петербург, наб.Макарова, д.2

Тел.: (812)3252113; Факс: (812)3282241; E-mail: LTPP@rambler.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТОЙКОСТИ
ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-БЛОДЖЕТТ МЕТОДОМ СТОЯЧИХ
РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН И РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ**

М.А. Чембелеева¹⁾, Ю.А. Дьякова¹⁾, А.Ю. Серегин¹⁾, С.Н. Якунин²⁾, Т.В. Букреева¹⁾,
Е.Ю. Терещенко¹⁾, М.В. Ковальчук¹⁾

¹⁾ *Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Упорядоченные органические пленки, в том числе пленки Ленгмюра-Блоджетт, имеют важное практическое значение для различных областей науки и техники. Один из ключевых вопросов – стабильность органических пленочных систем к физическим воздействиям. В данной работе проводили изучение термической стойкости многослойных ЛБ-пленок – методом стоячих рентгеновских волн (СРВ) и рентгеновской рефлектометрии исследовали изменение их структуры при нагреве.

Для проведения исследования были изготовлены пленки чередующихся бислоев стеарата свинца и сополимера фторалкилметаркилата с метакриловой кислотой. Образцы получали на автоматизированных установках Ленгмюра-Блоджетт KSV5000 LB и KSV Mini Trough (Финляндия). Исследования методом рентгеновской рефлектометрии были проведены на многофункциональном рентгеновском дифрактометре вращающимся анодом SmartLab (ЦКП ИК РАН) на излучении Cu K_α. Исследования методом СРВ в области полного внешнего отражения были проведены на синхротронной станции «Ленгмюр» (НИЦ «Курчатовский институт»), энергия излучения 13,5 кэВ.

Анализ полученных угловых зависимостей зеркальной компоненты рентгеновского отражения и выхода флуоресценции от образцов до и после их термообработки показал, что температура, при которой происходит заметное ухудшение периодической структуры пленок стеарата свинца, ниже, чем для пленок стеарата свинца с дополнительными слоями сополимера.

Чембелеева Маргарита Александровна
119333, Москва, Ленинский пр-т., д. 59
Тел.: (499)1350251; Факс: (499)1351011; E-mail: chembeleeva.m@gmail.com

ПОЗИТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПОР В ПОЛИМЕРНЫХ МЕМБРАНАХ

В.П. Шантарович¹⁾, Ю.А. Новиков²⁾

¹⁾ *Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва*

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

Проблема разделения и очистки газов и жидкостей актуальна для современной науки, промышленности и экологии. Решение этих проблем невозможно без эффективных фильтров, среди которых важную роль играют полимерные мембраны – один из видов современных наноматериалов. Обладая вследствие особенностей химической структуры высокой концентрацией собственных нанопор ($10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$) эти материалы имеют высокую проницаемость и селективность- характеристики, определяющие высокую эффективность мембраны. Создание таких материалов требует развития соответствующих методов неразрушающего контроля в указанном диапазоне концентраций при размерах пор от долей до нескольких нанометров. Таким неразрушающим методом может быть метод аннигиляции позитронов.

В данном сообщении рассматриваются основные принципы позитронных экспериментов, где основным источником информации являются характеристики аннигиляционного излучения. Время жизни позитронов определяется размером пор, а эффективность образования позитрония, связанной системы позитрон-электрон, зависит от их концентрации. Математическая обработка спектров времени жизни позитронов позволяет получить распределение пор по размерам.

Таким образом, метод аннигиляции позитронов дает уникальную дополнительную информацию, которую нельзя получить традиционными способами.

Шантарович Виктор Петрович, профессор
119991, Москва, ул. Косыгина, д.4
Тел.: 8(495)9397132; Факс: (495)1378318; E-mail: shant@center.chph.ras.ru

МЕХАНОХИМИЧЕСКИЕ ТВЕРДОФАЗНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

С.В. Шевчук, Е.С. Быкова, В.В. Казанцева, Р.Б.Абылкалыкова

Сибирский федеральный университет, Красноярск

В данной работе исследуются процессы структурообразования в алюминиевых сплавах (АМг7, АД31, Д1), протекающие под действием пластической деформации. При этом могут образовываться фазы, оказывающие влияние на процесс обработки изделий при их изготовлении и на эксплуатационные характеристики изделий испытывающих механические нагрузки.

Для образования новых фаз необходимо перераспределение составляющих сплава, которое может быть осуществлено только диффузией. Но классическая диффузия требует времени для ее протекания, а при пластической деформации, как правило, нагрузки воздействуют очень непродолжительно. Следовательно, для образования новых фаз в таких условиях в сплавах должна иметь место аномальная диффузия.

В сплаве АМг7 было обнаружено существенное изменение фазового состава сплава после твердофазных превращений протекающих при пластической деформации. Образование новой фазы неизбежно требует активной диффузии в процессе пластической деформации. Диффузия в таких условиях может быть только аномальной. Также в процессе ударного нагружения в сплаве АМг7 происходит перераспределение химического состава в локальных областях, приводящее к образованию структурных неоднородностей.

Анализ микроструктуры изломов образцов сплава АД31, разорванных под действием растягивающей нагрузки, показал, что на дне сформировавшихся «кратеров» находятся частицы, состав которых существенно отличается от среднего состава сплава (обогащены легирующими элементами). Такие частицы могли сформироваться под действием твердофазных реакций в процессе пластической деформации.

Д1. В результате трибологических испытаний обнаружено образование новых фаз в области контакта трущихся поверхностей. Причина появления новых фаз связана с твердофазными превращениями, инициированными механической нагрузкой, превышающей предел текучести материала в зоне контакта.

Шевчук Светлана Владимировна

660074, Красноярск ул. Борисова, д.6, кв.432

Тел.: +79233127300; Факс: 8(391)2912561; E-mail: kveglis@iph.krasn.ru

ИССЛЕДОВАНИЯ ПОРИСТЫХ СЛОЕВ PbTe и PbSe МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ И РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

С.В.Шилов, А.П.Петраков

Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар

Были исследованы нанопористые слои PbTe, полученные методом электрохимического травления структур PbTe/PbSe/CaF₂/Si(111) в электролите Норра при различных плотностях тока и времени анодирования. Структуры создавались методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Результаты сравнивались с данными, полученными для образца PbSe/CaF₂/Si(111).

Исследования формы и размеров пор проводили методом трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии на медном излучении с $\lambda=1.54 \text{ \AA}$. По положению угла полного внешнего отражения с помощью рентгеновской рефлектометрии определялась пористость пленок.

Средние размеры пор вдоль и перпендикулярно поверхности оценены с помощью кривых трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии (ТРД). При плотностях тока до 4 мА/см² поры в пленках PbTe вытянуты перпендикулярно поверхности. При возрастании плотности до 6 мА/см², асимметрия размеров пропадает и форма пор становится близкой к сферической. Средний размер пор при $j < 4 \text{ мА/см}^2$ для пленок PbTe вдоль и перпендикулярно поверхности составили соответственно 55 и 160 нм. При $j = 6 \text{ мА/см}^2$ форма приблизительно сферическая с диаметром 130 нм. Величина пористости изменялась от 40 до 68% и зависела от длительности анодирования и плотности тока.

Для пленки PbSe при плотности тока $j = 4 \text{ мА/см}^2$ и длительности анодирования 20 минут пористость составила 62%, а поры по форме приблизительно сферические с характерным размером 80 нм.

По результатам сканирующей электронной микроскопии, размеры пор находятся в согласии с величинами, полученными методом ТРД.

Работа выполнена в рамках Программы «Развитие научного потенциала высшей школы» (проект 2.1.1/5848).

Шилов Сергей Владимирович

167001, Сыктывкар, Октябрьский проспект, д. 55, Сыктывкарский госуниверситет

Тел.: (8212)436729 (доп 131); Факс: (8212)436820; E-mail: petrakov@syktsu.ru

ЭФФЕКТ РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ОТРАЖЕНИЯ ПУЧКА ЭЛЕКТРОНОВ, ПАДАЮЩЕГО НА ТОНКУЮ ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНУЮ ПЛЕНКУ

С.М.Шкорняков

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

Теоретически предсказывается эффект размерного квантования коэффициентов прохождения и отражения электронов, падающих под малым углом скольжения на тонкую монокристаллическую пленку на подложке. Предлагается два способа экспериментального наблюдения коэффициента отражения. В первой схеме, меняя малый угол скольжения α пучка электронов с энергией частиц порядка 10 кэВ, можно измерять изменение интенсивности пучка зеркально отраженных электронов. В этом случае предсказывается наличие таких диапазонов изменения угла α , в которых зависимость интенсивности от угла носит периодический характер. Во второй схеме измеряются колебания интенсивности дифрагированного пучка в зависимости от изменения угла отражения β для фиксированного малого (порядка 1° - 3°) угла скольжения α .

Второй вариант соответствует, таким образом, исследованию распределения интенсивности вдоль тяжей-рефлексов для дифракции на отражение от гладкой поверхности. Во втором случае предсказывается появление упруго рассеянных электронов вдоль тяжей между дифракционными рефлексами с периодическим изменением интенсивности пучка в зависимости от угла β .

Шкорняков Сергей Михайлович
117333, Москва, Ленинский просп., д.59
Тел.: 8(499)1354520

ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ СЕНСОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ СОСТАВА SiO_2CuO_x НА ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ И DFT МЕТОДОВ

В.А.Шматко¹⁾, Т.Н. Назарова²⁾, В.В. Петров²⁾, Г.Э.Яловега¹⁾

1) Южный федеральный университет, физический факультет

2) Южный федеральный университет, ТТИ

В настоящей работе был исследован ряд образцов SiO_2CuO_x синтезированных золь-гель методом и прошедших термическую обработку при температурах 150-700°C.

Газочувствительные свойства рабочих слоев сенсоров во многом зависят от микроструктуры и фазового состава поверхности. Элементный и химический состав образцов исследовались методами рентгеновской спектроскопии поглощения и фотоэлектронной спектроскопии. Экспериментальные спектры исследуемых образцов получены на Российско-Германском канале синхротронного излучения (RBL) электронного накопителя Бэсси II (Берлин).

Обнаружено, что в материалах, полученных в виде порошков, прошедших термическую обработку при температуре 300° и 500°C формируется соединение меди соответствующее фазе CuO , а дальнейшее увеличение температуры приводит к формированию 2-х фаз: фазы CuO и металлической фазы меди. На основе компонентного анализа было установлено, что соотношение металлической фазы и фазы CuO составляет ~1/9 для образца, полученного при температурной обработке 700°C и является фактором улучшающим газочувствительные свойства исследуемых материалов.

В материалах, полученных в виде пленок, присутствуют фазы оксидов меди CuO и Cu_2O , а также фаза двойного оксида CuSiO_3 . При этом можно говорить о тенденции изменения фазового состава при увеличении концентрации оксидов меди в пленке и о влиянии на фазовый состав модификаторов – оксидов олова. На основе теории функционала плотности проведено исследование механизма взаимодействия газ - поверхность при взаимодействии диоксида азота с поверхностью газочувствительного материала.

Валентина Анатольевна Шматко

344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5

Тел.: (863)2975126; Факс(863)2975120; E-mail: shmatko86@mail.ru

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНЫХ ТРАНСФОРМАЦИЙ НАНОПОРОШКОВ BaTiO_3 и PbTiO_3 В ТОНКИХ СЛОЯХ ОКСИДНЫХ СТЕКОЛ

И.М.Шмытько, В.В.Кедров

*Институт физики твёрдого тела Российской Академии Наук,
Черноголовка*

Методами рентгеновской дифрактометрии и электронной сканирующей микроскопии изучено влияние тонких слоев (2,5-20 мкм) расплавов некоторых свинцово- и натриево-боратных оксидных стёкол на нанокристаллиты BaTiO_3 и PbTiO_3 . Показано, что расплавы свинцово-боратных и натриево-боратных стекол приводят к растворению нанокристаллитов BaTiO_3 уже при 550°C и последующей кристаллизации в стекле уже титаната свинца и, соответственно, титаната натрия (Na_2TiO_3). Полученные новые перовскитные соединения являются устойчивыми вплоть до температуры 1000°C , выше которой они трансформируются в стеклообразное состояние.

Обнаружено сильное ориентирующее влияние тонких слоёв (2,5-20 мкм) расплавов этих стёкол на кристаллиты вновь синтезированных из титаната бария соединений PbTiO_3 and Na_2TiO_3 . Результатом ориентирующего действия этих слоев стекла является образование ярко выраженной текстуры кристаллитов полученных перовскитов с осями текстуры вдоль направлений $[100]$ и $[001]$, параллельных нормали к подложке.

Совершенно другая ситуация реализуется при внедрении готового микрокристаллического порошка титанат свинца в расплав свинцово-боратного стекла. Уже при 600°C он растворяется и никакой обратной кристаллизации не происходит при последующем понижении температуры расплава.

Изучена природа стабилизации PbTiO_3 до высоких температур при получении его посредством перекристаллизации в расплаве свинцово-боратного оксидного стекла из титаната бария и полное растворение кристаллитов чистого титаната свинца в расплаве этого стекла.

Шмытько Иван Михайлович, в.н.с., д. ф.-м.н.
142432, Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д.2
Тел.: (496)5225485; E-mail: shim@issp.ac.ru

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКРЕМНИЯ

С.В. Шушков, В.Вал. Соболев, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Оптическим свойствам полупроводниковых нанокристаллов посвящено много теоретических и экспериментальных работ. Однако большинство из них ограничено областью около длинноволнового края поглощения. В работе [1] измерены эллипсометрические спектры диэлектрической проницаемости в области 0.5 – 5 эВ нанокристаллов кремния в матрице кварца с диаметром нанокристаллов $d=8.2, 7.5, 5.2, 4.7$ и 4.2 нм. Спектр $\varepsilon_2(E)$ объемного монокристалла кремния содержит два максимума при ~ 3.4 и 4.2 эВ [2]. Для нано кремния в матрице SiO_2 характерно очень сильное понижение интенсивности максимума при 4.2 эВ ($d=8.2, 7.5$ нм), понижение интенсивности обоих пиков $\varepsilon_2(E)$ в \sim четыре раза для $d=5.2$ нм и появление интенсивного хвоста для $E < 3.4$ эВ. Наиболее полезную информацию об оптических свойствах содержит комплекс оптических функций ($R, n, k, \sigma, E^2\varepsilon_2, \varepsilon_2, \varepsilon_1, -\text{Im}\varepsilon^{-1}, n_{\text{eff}}$ и др.). Его нахождение – первая задача оптической спектроскопии. Вторую задачу составляет разложение $\varepsilon_2(E)$ и $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ на элементарные компоненты и определение параметров поперечных и продольных компонент переходов. На основе экспериментальных спектров $\varepsilon_2(E)$ и $\varepsilon_1(E)$ нанокремния в матрице SiO_2 работы [1] нами были решены обе задачи оптической спектроскопии. Установлены основные особенности спектров комплексов оптических функций пяти нанообразцов разных диаметров нанообразований кремния в SiO_2 , определены их основные компоненты полос переходов и их зависимости от диаметров нанообразований. Расчёты выполнены, применяя пакеты компьютерных программ, разработанных на основе интегральных соотношений Крамерса-Кронига и аналитических формул, а также модели объединённых диаграмм Арганда.

1. Alonso M.L. et al. Phys. Rev. B. 82, 045302 (2010).

2. Соболев В.В., Неможкаленко В.В. Электронная структура полупроводников. Киев: Наук. думка, 1988. 423 с.

Шушков Сергей Владимирович

426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1

Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

ДЕФОРМАЦИИ И ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА КОРОТКОПЕРИОДНЫХ СВЕРХРЕШЕТОК AlN/GaN

М.П.Щеглов, Р.Н. Кютт, В. В. Ратников, В.Ю. Давыдов, А.Н. Смирнов,
М.М. Рожавская, Е.Е. Заварин, М.А. Яговкина

Физико-технический институт им А.Ф.Иоффе РАН

Методами рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии проведены структурные исследования короткопериодных гексагональных сверхрешеток (СР) GaN/AlN. Образцы были выращены методом МОГФЭ в горизонтальном реакторе при температуре 1050°C на подложках (0001) Al₂O₃ с использованием буферных слоев GaN и AlN. Период СР изменялся от 2 до 6 нм, а толщина структур варьировалась в диапазоне от 0.3 до 1 μм.

Комплекс рентгенодифракционных методик включал измерение кривых θ -2 θ -сканирования симметричного брэгговского отражения, построение карт распределения интенсивности асимметричных отражений, измерение и анализ уширений дифракционных пиков в различной геометрии дифракции, прецизионное измерение параметров решетки и определение радиусов кривизны. Из θ -2 θ -кривых с последующим моделированием определены толщина и деформация отдельных слоев СР. Показано, что для большинства образцов СР полностью релаксированы в целом, а между подслоями релаксации нет, что приводит к противоположным по знаку значениям деформации для подслоев AlN и GaN (порядка $2 \cdot 10^{-3}$).

Полученные значения деформации в отдельных слоях СР были использованы для уточнения имеющихся в литературе значений констант деформационных потенциалов фононов в GaN и AlN. Надежное знание этих фундаментальных характеристик позволяет бесконтактно получать данные о деформациях во всех слоях таких структур методом конфокальной раман - спектроскопии.

Анализ полуширин позволил определить плотности отдельных семейств дислокаций и наблюдать их изменение от буферных слоев к СР.

Работа была поддержана РФФИ (грант 09-02-01280) и программой РАН "Физика новых материалов и структур".

Щеглов Михаил Петрович
194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26,
Тел.: 8(812)5159238; E-mail: m.scheglov@mail.ioffe.ru

ФРАКТАЛЬНЫЕ АТТРАКТИВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРАННОЙ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИИ И СИСТЕМА НАНОТРУБОК ТИТАНА

С.А. Щеголева, В.В. Юдин, П.Л. Титов, Н.Б. Кондриков, А.С. Заиченко
Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

Исследовался режим анодного окисления в вязком активном электролите на основе фторида аммония в глицерине, который приводит к формированию высокоупорядоченного массива нанотрубок оксида титана. Ставились и решались две задачи. Первая состояла в проверке гипотезы о странности диффузионного тока (ДТ), а также в установлении типа аттрактора ДТ (бистабильный многоцикловый кантороподобный аттрактор). Вторая задача – диагностика по дифракционной картине Фраунгофера характера упорядочения титановых нанотрубок в целом (нелинейная модуляционная структура). Проводилась оценка фрактальных размерностей в методиках Грассбергера-Прокаччо и потоков проекций центров нанотрубок из ε -окрестности грида. Локальный порядок оценивался при помощи конфигурационной энтропии первой координационной сферы нанотрубок (41,5% в среднем от симплекс-упорядочения). Диффузионный импульс обладает скейлинговой тонкой структурой с $\gamma = -0,348$, что указывает на гиперболический далекодействующий фронт. Тонкая структура выделялась фильтрацией, где четко проявилась квазистохастическая бистабильность. Был построен аттрактор диффузионного тока, который представляет собой бистабильную в целом систему жестких циклов, управляемых кантороподобной структурой ВЧ-несущей. Амплитудная гистограмма аттрактора указывает на обобщенный закон Ципфа-Парето-Мандельброта и эффект полетов Леви (резкие всплески в аттракторе). Видимо, имеется двойная система легких и тяжелых броуновских ионов, которые взаимодействуя между собой, дают большие скачки. Тем самым, подводя итог, мы столкнулись со свойством странности диффузионного тока. Видимо, это свойство приводит к локальному упорядочению кластеров и к интегральному высокому упорядочению системы нанотрубок оксида титана.

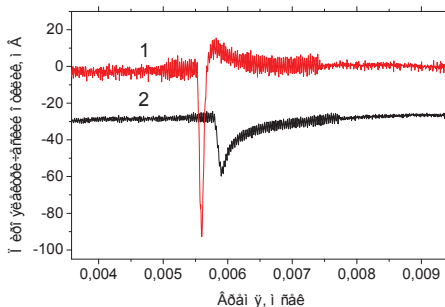
Щеголева Светлана Анатольевна, доцент, к.ф.-м.н.
690950, Владивосток, Суханова, 8, ДВФУ
Тел: (4232)432706, E-mail: sveta170@bk.ru

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ТОНКИХ ПЛЁНКАХ ЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОГО ФТАЛОЦИАНИНА

С.В.Яблонский, С.Г.Юдин, А.В. Алпатова, А.С. Михайлов

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

Со времени открытия полупроводниковых свойств металлических фталоцианинов [1] эти вещества привлекают к себе особое внимание, благодаря своей химической стабильности и большому разнообразию химических модификаций. Имеется сообщение о сегнетоэлектрическом переключении в центросимметричном фталоцианине меди (PcCu) [2]. Нами же в данной работе в PсCu впервые обнаружен пирозлектрический эффект. Эффект по величине оказался сопоставимым с пирозлектрическим эффектом в сегнетоэлектрических полимерах на основе поливинилиденфторида и его производных. На рисунке показаны пирозлектрические отклики на импульс инфракрасного лазера ($\lambda=1.06$ мкм). Кривая 1 соответствует коммерческому органическому пирозлектрику тетрааминобифенилу, с пирозлектрическим коэффициентом $\gamma=5\text{нКул/см}^2\text{К}$, а кривая 2 – вакуумно-напылённой плёнке PсCu ($\gamma=1.7\text{нКул/см}^2\text{К}$). Отличительной чертой пирозлектрического эффекта в центросимметричной структуре на основе PсCu является отсутствие обратного выброса при охлаждении образца. Природа наблюдаемых явлений не ясна и требует дальнейших исследований. Работа выполнена при поддержке РФФИ № 09-08-00362-а.



1. D. D. Eley, Nature (London) 162, 819 (1948)
2. L. M. Blinov and N. A. Kirichenko, Sov. Phys. Solid State 12, 1246 (1971)

Яблонский Сергей Валерьевич, в.н.с.
117198, Москва, ул.Миклухо-Маклая, д.6
Тел.: 8(499)4345300; Факс: 8(499)4331511; E-mail: ivanovii@mail.ru

ВЫЯВЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ ВОГНУТЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ СКОЛЬЗЯЩИМ РЕНТГЕНОВСКИМ ПУЧКОМ

И.В. Якимчук^{1),2)}, А.В. Бузмаков¹⁾, А.В. Андреев²⁾, В.Е. Асадчиков¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

В работе рассматривается способ изучения поверхностей вогнутых сферических зеркал, основанный на эффекте шепчущей галереи в жестком рентгеновском диапазоне. Распространение рентгеновского пучка вдоль сферической поверхности имеет ряд особенностей, подробно рассмотренных в [1]. При определенном взаимном расположении зеркала и источника из широкого падающего пучка «вырезается» часть, такая, что поле падающей волны существует лишь в тонком (~1 мкм) приповерхностном слое, а его проекция на сферическую поверхность представляет собой полосу шириной ~13 мм. В том случае, когда на пути падающего пучка имеется некоторый дефект поверхности, распределение интенсивности отраженного пучка будет иметь соответствующий минимум. Т.о. окончательно отразившись от зеркала, пучок будет «содержать» в себе информацию о качестве той части сферической поверхности, вдоль которой он распространялся. Проведя серию измерений, в которых зеркало освещается с разных сторон, можно подобно методу томографии восстановить поверхностное распределение локальных коэффициентов ослабления пучка.

У предлагаемого подхода есть ряд особенностей, усложняющих проведение эксперимента и обработку данных. Тем не менее, уже полученные и представленные результаты первых экспериментов не вызывают сомнений в работоспособности предложенной методики. Достигнутое пространственное разрешение на данный момент составляет около ~50 мкм.

1. Якимчук, И.В., Рошин, Б.С., Кожевников И.В. и др., Кристаллография, 53 (2008) №6 1111-1117.

Якимчук Иван Викторович

119333, Москва, Ленинский пр., дом 59

Тел.: 8(499)1355100; Факс: 8(499)1355100; E-mail: yaivan@list.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК $(\text{HfO}_2)_x(\text{Sc}_2\text{O}_3)_{1-x}$ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л.В. Яковкина, Т.П. Смирнова, В.О. Борисов

Учреждение РАН Институт неорганической химии

им. А.В. Николаева СО РАН

Продолжающаяся миниатюризация электронных устройств на основе МДП – структур основана на замене SiO_2 на диэлектрик с высоким значением диэлектрической константы (high-k). Пленки HfO_2 , рассматриваемые в качестве наиболее перспективных, имеют равновесную моноклинную структуру, диэлектрическая константа которой $k=16$. Неравновесные при стандартных условиях тетрагональная и кубическая модификации имеют более высокие значения диэлектрической константы, 70 и 29 соответственно. Кубическая или тетрагональная модификации могут быть стабилизированы легированием HfO_2 редкоземельными элементами.

Пленки HfO_2 , легированные скандием были получены методом химического осаждения из газовой фазы. В качестве прекурсоров использовались 2,2,6,6,тетраметил-3,5 гептандионат гафния ($\text{Hf}(\text{thd})_4$) и 2,2,6,6,тетраметил-3,5 гептандионат скандия ($\text{Sc}(\text{thd})_3$). Структура пленок исследовалась методом рентгеновской дифракции. ($\lambda = 1,5405\text{\AA}$) с использованием синхротронного излучения и скользящего луча падения света на образец (ИЯФ СО РАН).

Получен ряд твердых растворов, имеющих кристаллическую структуру с размером кристаллов от ~5 до 20 нм. Размер кристаллитов зависит от соотношения Sc/Hf в пленке. Изучена зависимость структуры пленок от концентрации Sc при его варьировании в пределах от 0.5 до 40 ат.%. В интервале концентраций от 9 до 14 ат.% скандия формируются пленки состава $(\text{HfO}_2)_{0,84}(\text{Sc}_2\text{O}_3)_{0,16}$ орторобической структуры. Структура не меняется при отжиге пленок при $T=900^\circ\text{C}$. Пленки характеризуется высоким значением диэлектрической константы ($k\sim 42-44$) существенно превышающей значения диэлектрических констант HfO_2 и Sc_2O_3 .

Методом РФЭС показано, что по мере увеличения концентрации скандия, ширина запрещенной зоны увеличивается, достигая 6.0 эВ в реперном образце $\text{Sc}_2\text{O}_3/\text{Si}$. Эти данные дополнительно являются доказательством образования твердых растворов с равномерным распределением катионов гафния и скандия в структуре пленок.

Яковкина Любовь Владимировна, с.н.с

630090, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, д. 3

Тел.: (383)3309410; Факс: (499)4331511; E-mail: yakovk@niic.nsc.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ SnTe (100) МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ

Л.В.Яшина^{1,2)}, А.А.Волыхов^{1,2)}, Т.С.Зюбина³⁾, А.С.Зюбин³⁾, Р.Пюттнер⁴⁾

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

²⁾ *ОАО «ГИРЕДМЕТ», Москва*

³⁾ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

⁴⁾ *Institut für Experimentalphysik, Freie Universität Berlin, Berlin*

Адсорбция кислорода на поверхности полупроводниковых кристаллов напрямую влияет на эффективность приборов на их основе. Исследования показывают, что для тонких плёнок при окислении существенно изменяются различные свойства, в частности, тип проводимости и коэффициент Холла. Требуется изучение детального механизма процесса окисления поверхностей.

При помощи рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на синхротронном излучении в настоящей работе исследованы продукты окисления поверхности SnTe (100) чистым молекулярным кислородом при комнатной температуре в диапазоне экспозиций 10^4 – 10^{10} Л. Кинетика окисления в диапазоне экспозиций 10^4 – 10^{15} Л изучена при помощи лабораторного оборудования.

Для интерпретации полученных экспериментальных данных в рамках теории функционала плотности (B3LYP/LanL2DZ) произведено моделирование адсорбции молекул кислорода на поверхности SnTe (100). Определены энтальпии адсорбции кислорода и химические сдвиги остовных уровней атомов олова и теллура, оцененные как изменения орбитальных энергий связи этих уровней. Предложен механизм ранних стадий окисления поверхности SnTe (100), объясняющий имеющиеся экспериментальные данные. Обнаружена тенденция к сегрегации оксида олова на поверхности в процессе окисления, которая отмечается и в эксперименте.

Яшина Лада Валерьевна, с.н.с.

119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Тел.: 8(495)9394665; Факс: 8(495)9390998; E-mail: yashina@inorg.chem.msu.ru

СЕКЦИЯ III

Структура и динамика трехмерных
систем

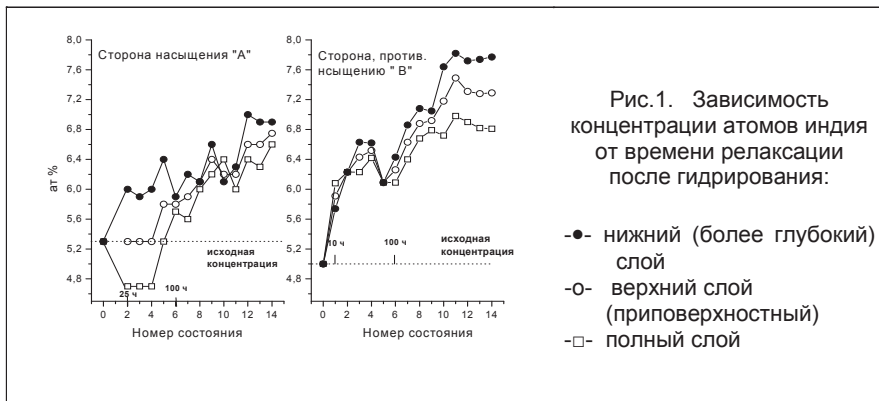
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

ИЗМЕНЕНИЕ ДИФфуЗИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ АТОМОВ ИНДИЯ В ФОЛЬГАХ СПЛАВА Pd-In-Ru В ПРОЦЕССЕ РЕЛАКСАЦИИ ПОСЛЕ ГИДРИРОВАНИЯ

В.М. Авдюхина, О.В. Акимова, И.С. Левин, Г.П. Ревкевич

Физический факультет МГУ, Москва

Методами рентгеновской прецизионной дифрактометрии проведены исследования изменения структурных характеристик 50 мкм фольги сплава Pd-5.3ат.% In-0.5ат.% Ru после ее электролитического гидрирования при плотности



тока 10 mA/cm^2 в течение 0,5 часа и последующей длительной релаксации (8200 ч).

Установлено, что на 500 часов релаксации наибольшая концентрация атомов индия наблюдается на глубине 3 ± 6 мкм с обеих сторон фольги. Разница в его концентрации в приповерхностном слое (до 3 мкм) и более глубоком слое (3-6 мкм) со стороны насыщения составляет 0.3ат.%, тогда как со стороны, противоположной насыщению, она составляет 0.5 ат.% индия.

Длительная релаксация в течение 8200 часов привела к существенному увеличению разброса концентрации атомов индия в ОКР всех ориентаций. Средняя концентрация атомов индия увеличилась с обеих сторон исследуемой фольги, что свидетельствует об увеличении диффузионной подвижности атомов индия после гидрирования фольги в процессе релаксации и их перемещении преимущественно из глубины образца к поверхности.

Авдюхина Валентина Михайловна, доцент

119899, Москва, Ленинские гр., МГУ, д.1, стр.2

Тел.: 8(495)9394610; Факс: 8(495)9394610; E-mail: vmaphys@gmail.com

ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ КАРКАСНО-КЛАСТЕРНЫХ БОРИДОВ f- и d-МЕТАЛЛОВ

П.А. Алексеев^{1,2)}, В.Н.Лазуков¹⁾, Ж-М. Миньо³⁾, К.С.Немковский^{1,4)}

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт» Москва, РФ

²⁾ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия

³⁾ Laboratoire Leon Brillouin, CEA-CNRS, CEA/Saclay, 91191 Gif sur Yvette, France

⁴⁾ Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich, Germany

Соединения типа MB_x , где $x \geq 6$, относятся к т. н. высшим боридам и формируются на основе трехмерной решетки из борных кластеров B_6 или B_{12} , в пустотах которой и располагаются $2x$ или $3x$ валентные ионы металла (M). Представлены результаты экспериментальных исследований динамики решетки в каркасно-кластерных системах MB_{12} ($M=Yb, Lu, Zr$), выполненных методом рассеяния нейтронов в сочетании с расчетами на основе феноменологической модели силового взаимодействия и расчетами *ab initio*.

Обнаружено принципиальное сходство между системами типа MB_6 и MB_{12} . На фононных дисперсионных кривых имеются протяженные плоские участки, высокоэнергетическая часть спектра связана с динамикой собственно борных кластеров, граничная энергия спектров лежит в области 130-160 мэВ. Особенности фононных спектров были проанализированы с точки зрения простых модельных представлений и оказались связанными с иерархичностью взаимодействий, когда самым слабым является взаимодействие M-M, а самым сильным – B-B. Отличие масштабов достигает 10^2 .

Выполнены *ab initio* расчеты фононных дисперсионных кривых и плотности состояний на основе метода функционала плотности в рамках LDA-приближения. Получено хорошее согласие с экспериментом в области частот борных колебаний, но заметные расхождения для некоторых низкоэнергетических мод, где важен вклад металлических (с электронами f- и d- типа) ионов. Исследованы проявления в динамике кристаллической решетки эффектов сильных корреляций для редкоземельных соединений, а также перехода в сверхпроводящее состояние в ZrB_{12} . Обнаружена взаимосвязь между параметрами низкоэнергетических фононов в YbB_{12} и спектром возбуждений f-электронов, трансформирующимся при переходе системы в немагнитное основное состояние со спиновой и зарядовой щелями.

Алексеев Павел Александрович, д.ф.-м.н., профессор
123182, Москва, ул. пл. Ак И.В.Курчатова, д.1
Тел.: (499)1967662; E-mail: paval@issph.kiae.ru

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗДЕЛА В ФОРМИРОВАНИИ СВОЙСТВ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Р.А. Андриевский

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

В настоящее время в создании широкого круга перспективных материалов всё большее распространение приобретает наноструктурный подход, т.е. использование основных элементов структуры (зерен, слоев, фазовых включений и пор) с размерами на уровне примерно 100 нм и менее. В этой связи проблема размерных эффектов, выявляющих влияние характерных размеров этих структурных элементов на физико-механические и физико-химические свойства, представляется одной из важнейших в современном наноструктурном материаловедении, поскольку она охватывает практически все разновидности наноматериалов. Однако свойства последних определяются не только размером структурных элементов, но существенно зависят от состояния их поверхностей раздела, наличия остаточных напряжений, концентрационных сегрегаций и др.

В докладе анализируется влияние особенностей поверхностей раздела (гомо- и гетерофазных границ зерен и слоев, а также тройных стыков) на структурно-чувствительные (механические и диффузионные) и другие свойства наноматериалов на основе металлов, сплавов и соединений [1,2]. На примере наноструктурных одно- и многослойных пленок характеризуется роль поверхностей раздела как стоков для удаления радиационных дефектов и повышения радиационной стабильности наноматериалов [3].

Литература

1. Р.А. Андриевский, А.М. Глезер. Успехи физич. наук, **179**, № 4, 337-358 (2009).
2. Р.А. Андриевский, А.В. Хачоян. Российский химич. журнал, **LIII**, № 2, 4-15 (2009).
3. Р.А. Андриевский. Физика металлов и металловедение, **110**, № 3, 243-254 (2010).

Андриевский Ростислав Александрович, профессор
142432, г. Черноголовка Московской области, проспект Семенова, 1
Тел.: (496)5227793; Факс: (496)5223507; E-mail: ara@icp.ac.ru

ДИФFUЗНОЕ РАССЕЯНИЕ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ И СОВРЕМЕННЫЙ УРОВЕНЬ ИНТЕРПРЕТАЦИИ

А.А. Босак¹⁾, Д.Ю. Чернышов²⁾, М. Криш¹⁾

¹⁾ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

²⁾ Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, Grenoble, France

Растущий интерес к теме диффузного рассеяния объясняется тем, что оно несет информацию не только о средней структуре, но и о ее коррелированных искажениях – статических и динамических. Количество работ, восстанавливающих коррелированный структурный беспорядок на основе диффузного рассеяния, неуклонно увеличивается – благодаря появлению ярких источников излучения и доступности двумерных детекторов.

Следует отметить, что в отличие от «традиционной» дифракции, для диффузного рассеяния не выработаны единые протоколы редукции и обработки. В наших работах мы демонстрируем:

- необходимость трехмерного картирования обратного пространства для получения осмысленного результата

- необходимость учета/разделения вкладов (квази)упругого и неупругого рассеяния

- возможность восстановления динамики решетки из данных диффузного рассеяния (ab initio подход + ограничения методологии)

- возможность получения информации о поверхности Ферми как в неупругом, так и в упругом сигнале.

Настоящий доклад, посвященный текущему состоянию области знания, проиллюстрирован решениями реальных задач – в основном на основе экспериментальных данных, полученных в Европейском центре синхротронного излучения.

Босак Алексей Алексеевич

France, 38043, Grenoble 6 rue Jules Horowitz

Тел.: +33 4 76 88 26 52; Факс: +33 4 76 88 29 04; E-mail: bossak@esrf.fr

ПЕРЕХОД ИЗОЛЯТОР – МЕТАЛЛ В NiO

А.Г. Гаврилюк^{1,2)}, И.А. Троян¹⁾, В.В. Стружкин³⁾, В.Б. Пракапенка⁴⁾,

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.*

³⁾ *Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Washington DC, USA*

⁴⁾ *Center for Advanced Radiation Sources, University of Chicago, Chicago, USA*

В работе сообщается об экспериментальном обнаружении перехода диэлектрик-металл в классическом моттовском диэлектрике - монооксиде никеля NiO при сверхвысоких давлениях ~240 ГПа. Комплексные измерения проведены различными методами в камерах высокого давления с алмазными наковальнями. Установлено, что электросопротивление становится измеримым при давлениях порядка 130 ГПа, затем уменьшилось примерно в 20 раз до давления перехода ~240 ГПа. В момент перехода величина сопротивления резко падает на три порядка и полупроводниковый температурный ход сопротивления меняется на металлический. Это первое экспериментальное наблюдение перехода диэлектрик - метал в NiO, предсказанное Моттом около сорока лет тому назад. Из предварительных экспериментов по рентгеновской дифракции обнаружено, что переход является изоструктурным переходом первого рода со скачком объёма элементарной ячейки на 2.7%. Данные оптического эксперимента и теоретические расчёты показывают, что металлическая фаза NiO формируется когда эффективная энергия Мотта-Хаббарда U_{eff} становится сравнимой с полной шириной d-зоны $2W$.

Работа выполнена при поддержке Программы ОФН РАН «Сильно коррелированные электронные системы», гранты РФФИ № 11-02-00636, 11-02-00291-а, 09-02-01527-а и 11-02-12089-офи-м.

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В NaNbO_3 ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ И ТЕМПЕРАТУРЕ

С.Г. Джабаров^{1,2)}, С.Е. Кичанов¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, А.И. Мамедов²⁾, Е.В. Лукин¹⁾,
Б.Н.Савенко¹⁾, К. Лате³⁾

¹⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия*

²⁾ *Институт Физики НАНА, AZ-1143, Баку, Азербайджан*

³⁾ *Helmholtz Centre Potsdam, Telegrafenberg, 14473 Potsdam, Germany*

Ниобат натрия NaNbO_3 является классическим антисегнетоэлектриком. Интерес к этому соединению связан с большим числом структурных фазовых переходов в этом соединении при варьировании температуры. Однако, исследований структурных изменений этого соединения при высоком давлении не проводилось.

В работе исследовались структурные изменения в NaNbO_3 методом рентгеновской дифракции в диапазоне температур 300-1100 К при давлениях до 4 ГПа.

При повышении температуры до 948 К была обнаружена новая фаза L с орторомбической структурой. При высоком давлении $P \sim 1.6$ ГПа обнаружен фазовый переход в орторомбическую фазу высокого давления HP. Построена фазовая диаграмма ниобата натрия в диапазоне давлений 0-4 ГПа и температур 300-1100 К.

Работа выполнена при поддержке гранта МД-696.2010.2, гранта РФФИ №09-02-00311-а, госконтрактов №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральных целевых программ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

Джабаров Сакин Гамид оглы, младший научный сотрудник
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, Объединенный институт ядерных исследований
Тел: (49621)66282; Факс: (49621)65882; E-mail: sakin@jinr.ru

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФИТОВЫХ КОМПОЗИТОВ ДЛЯ ЯДЕРНОЙ ТЕХНИКИ

Е.И. Жмуриков¹⁾, И.В. Савченко²⁾, С.В. Станкус²⁾, L. Tecchio³⁾

¹⁾*Институт ядерной физики им. Н.М. Будкера С О РАН, г. Новосибирск*

²⁾*Институт теплофизики им. С.С.Кутателадзе С О РАН, г. Новосибирск*

³⁾*Laboratori Nazionali di Legnaro - Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Legnaro, Italy*

Проведены измерения теплофизических характеристик промышленных графитов, традиционно используемых в ядерной технике, таких как МПГ-6 или CGD от SGL Carbon Group, а также впервые синтезированного графитового композита на основе изотопа углерода ^{13}C . Измерения проводились в диапазоне температур от комнатной до 1400°C методом лазерной вспышки на установке LFA-427 фирмы Netzsch (Германия). Эти данные сопоставлены с полученными ранее спектрами комбинационного рассеяния этих графитов, позволяющими выявить особенности фононного спектра графитов. Результаты измерений теплопроводности находятся в хорошем согласии с данными рентгеноструктурного анализа и результатами высокоразрешающей электронной микроскопии и могут быть использованы в тепловых расчётах конструкции графитовой мишени нейтронного конвертора.

Ключевые слова: теплопроводность, теплоёмкость, графит, изотоп графита ^{13}C

XPS СПЕКТРЫ И ОСОБЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ Fe-Vi-КОМПОЗИТАХ

В.В. Илясов¹⁾, Н.З. Ершов¹⁾, Н.З. Ляхов²⁾, Т.Ф. Григорьева²⁾, А.Т. Козаков³⁾,
К.А. Гуглев³⁾

¹⁾ *Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону*

²⁾ *Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

³⁾ *НИИ Физики Южного Федерального Университета, Ростов-на-Дону*

Изучено электронное строение вершины валентной полосы синтезированных Fe-Vi-композитов. Выполнены *ab initio* расчёты зонной структуры и DOS системы Vi-Fe для различных структурных позиций атома Vi: на поверхности (атом Vi - адсорбат); в поверхностных слоях (001) и (010) α -Fe. Расчёты выполнены в рамках DFT с использованием пакета Quantum-Espresso [1]. Изучен вероятный механизм атомарной стадии хемосорбции Vi с заполнением октапозиций ячейки α -Fe. Выполнена оптимизация атомной структуры «адсорбат Vi-Fe(001)» и получены равновесные длины связи. Для нерелаксированного состояния системы Vi/Fe(001) с атомом висмута в октапозиции (010) и в центре грани монослоя Fe(001) полная энергия составила -871,98 Ry/cell и -874,99 Ry/cell соответственно. Можно предположить, что разность значений этих энергий должна соответствовать по порядку величины энергии активации процесса. Полные DOS рассмотренных выше атомных структур сопоставлены с XPS спектрами, полученными на рентгеновском фотоэлектронном микрозонде ESCALAB 250. Рассчитанные электронные энергетические спектры системы Fe-Vi выявляют тонкую структуру валентной полосы, обнаруживая её трансформацию в ряду Fe-Vi/Fe-FeVi(001)-FeVi(010)-Vi. Обсуждаются закономерности и природа эволюции электронной структуры в Fe-Vi-композитах наноструктурированных при механической активации.

1. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).

Илясов Виктор Васильевич, профессор

344000, Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, д. 1

Тел.: (863)2738305; Факс: (863)2327953; E-mail: viily@mail.ru

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ НА ОСНОВЕ RNi

Е.С.Клементьев^{1,2,3)}, П.А.Алексеев^{2,3)}, В.Н.Лазуков²⁾, I.Mirebeau⁴⁾, А.В.Грибанов⁵⁾

1) *Институт ядерных исследований РАН, Москва*

2) *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

3) *НИЯУ МИФИ, Москва*

4) *Laboratoire Léon Brillouin, CEA-SNRS, CE Saclay, France*

5) *МГУ им М.В.Ломоносова, Москва*

Интерметаллические соединения $\text{Ce}_x(\text{Nd},\text{Pr})_{1-x}\text{Ni}$ были исследованы при помощи нейтронной дифракции и неупругого рассеяния нейтронов. Данные соединения являются квазибинарными системами, основанными на трех интерметаллидах с разным основным состоянием и физическими свойствами: промежуточно-валентной системе CeNi , ферромагнетике PrNi с механизмом упорядочения, связанным с поляризационной неустойчивостью основного синглета и появлением мягкой магнитной моды, крамерсовском магнетике NdNi . Были измерены: нейтронные дифрактограммы поликристаллических систем $\text{Ce}_x(\text{Nd},\text{Pr})_{1-x}\text{Ni}$ в температурном интервале 2К - 100К, спектры магнитных возбуждений монокристаллов $(\text{Ce},\text{La})_x\text{Pr}_{1-x}\text{Ni}$ при $3\text{K} < T < 100\text{K}$. Продемонстрировано значительное влияние частичной делокализации $4f$ электронов церия в данных квазибинарных системах на магнитное упорядочение в подрешетках Nd и Pr, являющихся ионами с хорошо локализованными магнитными моментами.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проекты РФФИ 11-02-01171-а и 11-02-00121-а).

Евгений Станиславович Клементьев, с.н.с.

117198, Москва, проспект 60-летия октября, 7а, ИЯИ РАН

Тел.: 8(496)7510191; Факс: 8(496)7510711; E-mail: clement@inr.ru

ОСОБЕННОСТИ МЕЗОСТРУКТУРЫ КСЕРОГЕЛЕЙ ГИДРОКСИДА ХРОМА (III), СИНТЕЗИРОВАННОГО В МОЩНОМ УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ

Г.П. Копица¹⁾, А.Е. Баранчиков²⁾, В.К. Иванов²⁾, О.С. Иванова²⁾,

Р. Klaus Pranzas³⁾, С.В. Григорьев¹⁾

¹⁾Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина, Россия

²⁾Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия

³⁾Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Один из наиболее перспективных подходов к синтезу неорганических материалов в высокодисперсном состоянии основан на использовании мощного ультразвукового (УЗ) воздействия. Вместе с тем, характер влияния УЗ обработки на гетерогенные системы, содержащие субмикронные частицы (в том числе, на золи и аморфные гели), остается к настоящему времени малоизученным.

Целью настоящей работы являлось изучение влияния мощной УЗ обработки на мезоструктуру аморфных ксерогелей $\text{Cr}(\text{OH})_3$, осаждаемых из растворов нитрата хрома(III) различной концентрации. В качестве основного метода анализа мезоструктуры аморфных ксерогелей гидроксида хрома(III) использовали метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Измерения МУРН были проведены в диапазоне переданных импульсов $2.6 \cdot 10^{-3} < q < 0.26 \text{ \AA}^{-1}$.

В отличие от общепринятых представлений о том, что УЗ воздействие не вызывает значительных изменений структуры аморфных гелей, состоящих из наноразмерных частиц, анализ данных МУРН позволил выявить существенное влияние УЗ на мезоструктуру аморфных ксерогелей гидроксида хрома(III): гомогенность, фрактальную размерность, а также на размеры агрегатов и образующих их мономерных частиц. Для выявления общих закономерностей влияния УЗ обработки на гетерогенные системы было проведено сравнение полученных данных с результатами нашей работы [1] на аморфных ксерогелях гидроксида железа(III), которые также были синтезированы в мощном УЗ поле.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Образования Российской Федерации (проект 14.740.11.0281).

1. V.K. Ivanov, G.P. Kopitsa, F.Yu. Sharikov, A.Ye. Baranchikov, A.S. Shaporev, S.V. Grigoriev and P. Klaus Pranzas 2010 *Phys. Rev. B* **81** 174201

Копица Геннадий Петрович

188300 Гатчина, Петербургский институт ядерной физики РАН

Тел.: (81371)46409; Факс: (81371)39023; E-mail: kopitsa@npni.spb.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОРАЗМЕРНОМ $\text{LiFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{PO}_4$ ПРИ ДЕИНТЕРКАЛЯЦИИ ЛИТИЯ МЕТОДОМ *IN SITU* ДИФРАКЦИИ СИ

Д.Д. Карнаушенко^{1,2)}, Н.В. Косова¹⁾, Е.Т. Девяткина¹⁾, А.И. Анчаров¹⁾, А.В. Марков²⁾, В.К. Макуха²⁾

¹⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск*

Современные достижения в области наноразмерных материалов дали мощный толчок к разработке новых катодных материалов на основе диэлектриков для литий-ионных аккумуляторов. Наиболее привлекательным на данный момент считается LiFePO_4 со структурой оливина. Понижение размеров частиц LiFePO_4 до наноуровня и создание наноразмерного электропроводящего углеродного покрытия позволили увеличить электропроводность LiFePO_4 на несколько порядков. Однако для улучшения циклирования при высоких скоростях желательно изменить механизм электрохимической интеркаляции/деинтеркаляции Li^+ в его структуру с двухфазного на однофазный. Ранее было установлено, что этому способствует понижение размеров частиц до наноуровня и частичное замещение ионов Fe^{2+} на Mn^{2+} . Однако большинство исследований было проведено методом *ex situ* рентгеновской дифракции. Результаты исследований методом *in situ* дифракции СИ малочисленны и противоречивы.

В данной работе проведено *in situ* (СИ) и *ex situ* (РФА) изучение структурных изменений при электрохимической интеркаляции/деинтеркаляции Li^+ из/в наноразмерного $\text{LiFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{PO}_4$, полученного с применением метода механической активации. На зарядно-разрядных кривых наблюдается два плато при 3,4 и 4,1 В, связанные с процессами окисления-восстановления $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ и $\text{Mn}^{2+}/\text{Mn}^{3+}$ соответственно. Установлено, что второму плато соответствует двухфазный механизм, а переходной области – однофазный. По данным *in situ* процесс окисления/восстановления $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ также становится однофазным, однако по данным *ex situ* остается двухфазным.

Карнаушенко Дмитрий

630128, Новосибирск, ул.Кутателадзе, д.18

Тел.: (383)3363843; Факс: (383)3322847; E-mail: KDmitryD@yandex.ru

О ПРИРОДЕ СТРУКТУРНОЙ «ПАМЯТИ СТЕКЛА» В $RE_2(MoO_4)_3$, $RE=Eu, Gd, Sm$

Е.А. Кудренко^{1,2)}, С.С. Хасанов¹⁾, В.В. Сеницын¹⁾, В.В. Роддатис²⁾, С.З. Шмурак¹⁾,
Б.С. Редькин¹⁾ и Е.Г. Понятовский¹⁾

¹⁾ *Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела
РАН, Черноголовка*

²⁾ *Российский научный центр Курчатовский институт, Москва*

Явление структурной «памяти стекла» впервые наблюдалось в соединениях $AlPO_4$, цеолитах $Y(Na-Y)$, клатрасилах и некоторых других материалах. Оно заключается в том, что монокристаллы/поликристаллы, подвергнутые твердофазной аморфизации, возвращаются в исходную кристаллическую фазу после снятия нагрузки. Более того, в случае $AlPO_4$ предполагалось, что монокристалл, аморфизованный высоким давлением, возвращается в монокристалл с первоначальной ориентацией. Однако природа и возможные механизмы этого явления до сих пор не ясны. В настоящей работе мы сообщаем об исследовании эффекта структурной «памяти стекла» в монокристаллах β' - $Eu_2(MoO_4)_3$. Ранее нами было установлено [1], что в результате воздействия давлением $\sim 7-9$ ГПа, поликристаллические образцы молибдатов R_3E претерпевают фазовый переход из исходной метастабильной β' - фазы в аморфноподобное состояние. В то время как, монокристалльные образцы $Eu_2(MoO_4)_3$ переходят в более сложное структурное состояние [2]. В данной работе мы провели детальный анализ структурного состояния монокристалла $Eu_2(MoO_4)_3$, подвергнутого воздействию высоким давлением, и исследовали структурные трансформации при последующих отжигах. В докладе будут представлены экспериментальные данные, полученные с использованием методов монокристалльного рентгеноструктурного анализа, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии высокого разрешения, которые наглядно демонстрируют причины возникновения эффекта структурной «памяти стекла» в молибдатах редкоземельных элементов.

1. V. Dmitriev et al., Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 64, pp.307-312, 2003

2. A.P.Kiselev, S.Z.Shmurak, V.V.Sinitsyn, S.S. Khasanov, B.S.Redkin, ,
A.V. Alekseev, Ponyatovsky E.G. Bulletin of RAS:Physics, vol.72, No9, pp.1297-1302, 2008.

Кудренко Елена Александровна, н.с.

142432, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Институтская,2

Тел.: (496)5222925; Факс: (496)5228160; E-mail: lenak@issp.ac.ru

**РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ
СЕМЕЙСТВА $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$**

И.П. Макарова, Т.С. Черная, И.А. Верин, В.В. Гребенев, В.В. Долбина

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Характерными особенностями семейства кристаллов $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4; X = S, Se, P$) является наличие низкотемпературных сегнето- или антисегнетоэлектрических фазовых переходов, приводящих к упорядочению протонов в двухминимумном потенциале водородной связи, высокотемпературных фазовых переходов, связанных с изменениями в системе водородных связей, наличие фаз с протонной проводимостью порядка 10^{-2} Ом/см при относительно невысоких температурах. Исследуемые соединения представляют интерес как для расширения существующих представлений о природе водородных связей и их влиянии на свойства кристаллических материалов, так и для прикладных исследований. Подобные кристаллы являются уникальными в классе протонных проводников, т.к. суперпротонная проводимость является свойством их структуры, а не следствием введения легирующих добавок.

Приведены результаты исследований структурной обусловленности аномалий физических свойств в ряде кристаллов: $K_3H(SO_4)_2$, в которых появление высокой протонной проводимости обусловлено формированием динамически разупорядоченной сетки водородных связей; $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$, в которых существенный вклад в ионную проводимость вносят также молекулы воды и ионы калия, смешанных гидросульфатфосфатов цезия, основное различие свойств которых связано со структурой сетки водородных связей. Полученные структурные данные позволяют сделать вывод о различии структурных механизмов проводимости в соединениях $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №09-02-00577, №11-02-01145).

Макарова Ирина Павловна
119333, Москва, Ленинский пр., д.59
Тел.: 8(499)1356420; Факс: 8(499)1351011; E-mail: secr@ns.crys.ras.ru

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И АКУСТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

Е.К. Наими¹⁾, О.М. Кугаенко¹⁾, В.С.Петраков¹⁾ С.С.Уварова¹⁾,
О.А. Бузанов²⁾, В.Н.Егоров²⁾, С.А.Сахаров²⁾

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

²⁾ *ОАО «Фомос-Материалс», Москва*

Лантан–галлиевый танталат (ГТЛ), является весьма перспективным пьезоэлектриком. Как и кварц, он относится к классу симметрии 32, но коэффициент электромеханической связи у ГТЛ в 3 раза выше, что позволяет создавать пьезоэлементы, работающие на прямом пьезоэффекте, для датчиков измерения давления в двигателях внутреннего сгорания, в условиях переменных нагрузок и температур. Кристаллы ГТЛ были выращены на предприятии ОАО «Фомос-Материалс» по методу Чохральского.

Целью данной работы является исследование влияния полученной в результате циклической деформации структуры на фазовую скорость, коэффициент затухания, внутреннее трение и другие параметры объемной акустической волны (ОАВ) в лангатате с помощью метода составного пьезоэлектрического вибратора (СПВ) при частотах порядка 10^5 Гц. Микроструктура кристаллов исследована методом рентгеноструктурного анализа и селективного травления.

Величина предела усталостной прочности кристаллов ГТЛ, предназначенных для работы в качестве датчиков давления, при комнатной температуре при симметричном циклическом нагружении сжатием с частотой 100 Гц составляет 10-15 кН/см², при количестве циклов нагружения (без образования видимых разрушений) $3 \cdot 10^5$.

Методом СПВ проведены исследования влияния микроструктуры, образовавшейся при циклической деформации и термоударе, на акустические параметры. Циклическая деформация образцов лангатата не влияет на величину эффективного модуля Юнга и фазовую скорость продольной ОАВ. Коэффициент затухания продольной ОАВ после циклической деформации увеличивается в 1,5–2 раза как в образцах X–, так и Z–среза. Зависимость внутреннего трения в образцах X-среза является амплитудно-независимой.

Наими Евгений Кадырович, д.ф.-м.н.
119049, Москва, Ленинский просп., д. 4
Тел.: 8(499)2366500; E-mail: crystal@misis.ru

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НОВЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ FeTe В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

П.Г. Наумов¹⁾, И.С. Любутин¹⁾, К.В. Фролов¹⁾, Е.В. Антипов²⁾, И.А. Троян¹⁾,
Н.Ю. Коротков¹⁾, М. Eremets³⁾, Т. Palasyuk³⁾, S. Medvedev³⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Московский Государственный университет, хим-фак, Москва*

³⁾ *Max Planck Institute for Chemistry, Mainz, Germany*

Новые железосодержащие сверхпроводники системы Fe_{1+x}(Te,Se) вызывают большой научный и практический интерес из-за сочетания сверхпроводимости с магнитным упорядочением. В проведенных ранее исследованиях было обнаружено, что при воздействии высокого давления в структуре Fe_{1+x}Se происходит значительный рост температуры сверхпроводящего перехода T_c [1]. В данной работе сообщается о синтезе и исследовании серии новых кристаллов Fe_{1+x}Te. Методом рамановской спектроскопии в области низких температур были получены спектры при давлениях до 20 ГПа. Кроме двух низкочастотных фоновых мод (ниже 200 см⁻¹), обнаружена высокочастотная мода (700 см⁻¹), связанная с возбуждением 3d электронов в Fe²⁺ ионах в кристаллическом поле [2]. В области низких температур данная мода демонстрирует линейный рост частоты с изломом в области температуры 100 К, что связано со структурным переходом из тетрагональной фазы в моноклинную [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 11-02-00636, 11-02-12089-офи-м и Программы ОФН РАН «Сильно коррелированные электронные системы».

1. S. Medvedev, et al., Nature Materials 8, 630 – 633 (2009).

2. I.W. Johnstone, et al., J. Phys. C 13 (1980) 2549.

3. M.K. Wu, et al., Physica C 469 (2009) 340.

Наумов Павел Георгиевич, к.ф.-м.н.

119333, Москва, ул.Бутлерова, д.17а

Тел.: 8(903)1547338; Факс: 8(495)3308329; E-mail: m2125@yandex.ru

РЕНТГЕНОВСКИЕ И МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫХ И МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ 3d-МЕТАЛЛОВ И ИХ СОЕДИНЕНИЙ

А.В. Нуриев¹⁾, Л.В. Кожитов¹⁾, В.Г. Костишин¹⁾, А.Т. Морченко¹⁾,
Н.А. Юданов¹⁾, Ю.М. Королев²⁾, К.В. Похолок³⁾, Д.С. Филимонов³⁾

¹⁾ *Институт новых материалов и нанотехнологий НИТУ МИСиС, Москва*

²⁾ *Институт нефтехимического синтеза РАН, Москва*

³⁾ *Химический факультет МГУ*

Приводятся результаты рентгенофазовых, мёссбауэровских магнитометрических и магнитофазовых исследований металлополимерных и металлоуглеродных наноконкомпозитов на основе полиакрилонитрила (ПАН) и поливинилового спирта (ПВС), полученных различными способами (высокотемпературный отжиг и химическое соосаждение прекурсоров при комнатной температуре). Объектами исследования служили образцы Fe/ПАН с массовой долей металла 28,6 % и 50 %, отожженные в вакууме при температуре 855 °С и 955 °С соответственно, и образцы Fe₃O₄/ПВС с содержанием металла 45% масс., полученные низкотемпературным синтезом. По данным рентгенофазового анализа (РФА) в системе Fe/ПАН 50% обнаружены фазы γ-Fe (средний размер частиц 30 нм), α-Fe (23 нм) и Fe₃C (12 нм), в Fe/ПАН 28,6% – фазы α-Fe (14 нм) и Fe₃C (17 нм).

Образцы для исследования представляли собой порошок, размолотый в агатовой ступке и спрессованный в цилиндрической кювете. Измерения намагниченности проводились при напряженности магнитного поля 10 кЭ в режиме нагрева и последующего охлаждения образца.

По температурным зависимостям намагниченности можно определить точки Кюри, соответствующие различным магнитным фазам, что позволяет анализировать фазовый состав многокомпонентных систем. Выявленный качественный фазовый состав композитов хорошо согласуется с результатами рентгенофазового анализа и мессбауэровских исследований. Получена количественная оценка содержания различных магнитных фаз. Для всех изученных образцов на фоне ниспадающих ветвей кривых были отмечены участки значительного увеличения намагниченности при росте температуры с максимумами вблизи 660°С для образцов Fe/ПАН и 420°С для Fe/ПВС. Этот эффект можно объяснить превращением части аморфной фазы в кристаллическую, укрупнением кристаллитов в процессе происходящих при нагреве химических превращений (продолжающегося процесса термически стимулированного синтеза) и/или агломерации самых малых частиц (кластеров) с возможным их переходом из суперпарамагнитного или даже магнитонеупорядоченного состояния в ферро- и ферримагнитное.

Нуриев Александр Вадимович
119049, Москва, ул. Ленинский пр., дом 4
Тел.: 8(926)3604645; E-mail: concussion@mail.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ba_xPb_{1-x}Fe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ ($X = 0.0, 0.1, 0.2, 1.0$)
МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И
СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ**

О.Е. Положенцев¹⁾, А.В. Солдатов¹⁾, А.Т. Козаков²⁾, К.А. Гуглев²⁾, И.П. Раевский²⁾,
А.В. Никольский²⁾, Я.В. Зубавичус³⁾

¹⁾ *Факультет физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

²⁾ *Научно-исследовательский институт физики ЮФУ, Ростов-на-Дону*

³⁾ *Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий, Москва*

$PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ проявляет антиферромагнитное упорядочение дальнего порядка при температуре Нееля $T_N=145K$. Температура ферроэлектрического фазового перехода очень чувствительна к замещениям в подрешетке Pb атомами Ba. Зависимость температуры Нееля T_N от концентрации замещений в твердых растворах $Ba_xPb_{1-x}Fe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ сильно изменяется, и природа такого изменения по-прежнему остается не ясной.

Целью настоящей работы является анализ рентгеновских фотоэлектронных спектров валентной области и спектров рентгеновского поглощения для определения электронной структуры в вершине валентной зоны и дна зоны проводимости твердых растворов $Ba_xPb_{1-x}Fe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ ($x = 0.0, 0.1, 0.2, 1.0$).

Рентгеноэлектронные спектры с поверхности исследовались с помощью рентгеновского фотоэлектронного микрозонда ESCALAB 250, а спектры рентгеновского поглощения за Fe K-краем исследуемых соединений измерялись в Курчатовском центре синхротронного излучения.

Электронная структура исследовалась на основе анализа полных и парциальных плотностей электронных состояний (DOS). Расчеты плотностей электронных состояний в вершине валентной зоны и дна зоны проводимости были проведены на основе теории функционала плотности (DFT) с использованием программного кода BAND2010 и метода многократного рассеяния фотоэлектрона с использованием программного кода FEFF9.

На основе анализа экспериментальных и теоретических спектров была определена электронная структура в вершине валентной зоны и дна зоны проводимости, выявлены особенности влияния примесных атомов бария на электронную структуру.

Положенцев Олег Евгеньевич, к.ф.-м.н.

344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге 5, ЮФУ, физический факультет

Тел.: (863)2975326; факс: (863)2975120; E-mail: olegpolozhentsev@mail.ru

ТОНКАЯ СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ КУПЕРИТА И СПЕРРИЛИТА

В.И. Рождествина¹⁾, А.А. Удовенко²⁾, Н.В. Мудровская¹⁾

¹⁾ *Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск*

²⁾ *Институт химии ДВО РАН, Владивосток*

В работе представлены результаты исследования тонкой структурной организации минералов платины: куперита (PtS) и сперрилита (PtAs₂). Куперит и сперрилит являются одними из основных минералов носителей Pt. Для Дальнего Востока характерно широкое развитие платиновых минералов в россыпях золота и отсутствие в большинстве случаев подтвержденной связи с коренными источниками. В связи с этим вопросы их генезиса и кристаллообразования остаются открытыми. Исследования монокристаллов проведены методами рентгеновской дифракции (Bruker SMART-1000 CCD), электронной микроскопии (JSM 6390LV JEOL) и рентгеноспектрального анализа (Oxford INCA Energy - Wave).

Согласно рентгеноспектральным электронно-зондовым исследованиям химический состав сперрилита и куперита близок к стехиометрии. Дифракционная картина исследованных образцов характеризуется присутствием дополнительных рефлексов ($\leq 40 \sigma(I)$) удваивающих параметр структур, описанных в литературе. Для всех образцов характерно высокие значения коэффициента экстинкции и фактора достоверности и нулевые значения тепловых параметров U_{ii} (0.00001) для атомов Pt и As; Pt и S. Дифракционная рентгеновская картина обратной решетки от тонких пластинок ($d \leq 0.03$ мм), наблюдаемая R_{Latt} программой, внешне не отличается от объемных кристаллов. На ней также присутствует небольшое количество слабых рефлексов ($< 40 \sigma(I)$), но уточнение структуры в пространственной группе, которая однозначно определяется по основным рефлексам, дает хорошие результаты. Тепловые параметры атомов имеют разумные величины, а фактор недостоверности структуры снижается.

В результате проведенных исследований установлено, что кристаллы куперита и сперрилита состоят из доменов, интенсивности отражений от которых накладываются, а результирующие интенсивности не соответствуют отражениям от монокристалла. При исследовании тонких пластинок, получаемых в результате сколов минерала по плоскостям спайности, интенсивность дополнительных рефлексов существенно снижается, в результате получается картина, характерная для монокристалла. Подтверждение мозаичности строения являются и электронно-микроскопические исследования.

Рождествина Вероника Ивановна
675000, Благовещенск, пер. Релочный, д.1
Тел.: (4162)225317; Факс: (4162)225325; E-mail: veronika@ascnet.ru

ВЛИЯНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ И СКОРОСТИ ТЕЧЕНИЯ РАСПЛАВА НА ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ Al_2O_3 ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ

Е.В. Саврук, С.В. Смирнов

*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Томск*

Эффективным способом улучшения структуры поверхности является ее оплавление лазерным излучением с плотностью мощности 10^5 – 10^6 Вт/см² с помощью импульсного излучения или путем сканирования лазерным лучом по поверхности изделий. Данные режимы обработки позволяют до минимума свести процессы испарения материала и рассматривать механизм оплавления поверхности как движение жидкой фазы за счет сил поверхностного натяжения. В данной работе с помощью растрового электронного микроскопа Raith150two (Германия) исследовано влияние глубокой ванны расплава и направления течения жидкой фазы и движения фронта кристаллизации на наноструктуру образующихся на поверхности α - Al_2O_3 новых фаз, в частности γ - Al_2O_3 . Показано, что форма кристаллитов зависит как от ориентации отдельных зерен, так и от направления и скорости течения расплава. С помощью электронно-микроскопического анализа установлено структурирование поверхности разного масштабного уровня. Макроструктурирование связано с глобальным улучшением поверхности, заплавлением межзеренных пор и созданием полос сканирования. Микроструктурирование связано с перекристаллизацией α -фазы Al_2O_3 , которая приводит к образованию структуры шевронного типа с изменением цвета поверхности вплоть до черного. Наноструктурирование связано с кристаллизацией второй фазы (γ - Al_2O_3) на поверхности кристаллитов α - Al_2O_3 . Таким образом, появляется возможность управления оптическими, механическими и электрическими свойствами поверхности за счет ориентированных определенным образом структурных образований. Наноструктурирование может быть использовано при создании высокочувствительных газовых сенсоров и дифракционных оптических приборов.

Саврук Елена Владимировна
634041, Томск, пр. Кирова, д.56 «А», кв. 443
Тел.: 8(923)4062769; E-mail: savruk@mail.ru

МЕССБАУЭРОВСКИЕ И РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ
ПЕРЕХОДОВ В $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_{3+\delta}$ ($x=0.05-0.20$)

В.Д.Седых¹⁾, И.И. Зверькова¹⁾, В.С. Русаков²⁾

¹⁾ *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

²⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

Методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии проведено систематическое исследование особенностей структурных превращений в $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_{3+\delta}$ ($x = 0.05 \div 0.20$) в зависимости от содержания бария и условий термообработки. Образцы синтезированы методом золь-гель на воздухе при температуре 1100°C . Для мессбауэровских исследований в соединение $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_{3+\delta}$ было введено 2% ^{57}Fe . Синтезированные образцы согласно рентгеновским данным являются однофазными и имеют ромбоэдрическую структуру (пространственная группа $R\text{-}3\text{c}$). Поскольку в манганитах лантана существуют обратимые фазовые переходы, то варьируя условия синтеза и термообработки можно получать ту или иную фазу, независимо от того, какая фаза синтезируется: $R\text{-}3\text{c}$, $Pnmal$, или $Pnmall$. Фазы $Pnmal$ и $Pnmall$ для исследуемого нами соединения, легированного барием, получены отжигом в вакууме синтезированных образцов с ромбоэдрической структурой.

Для легированного барием манганита лантана в исследуемой области концентраций бария до 20% при термообработке (вакуумный отжиг) исходная ромбоэдрическая фаза переходит в смесь фаз $Pnmall$, $Pnmall^*$ и $Pnmal$, причем с ростом содержания бария количество фазы $Pnmal$ увеличивается. В отличие от базового соединения $\text{LaMnO}_{3+\delta}$, в котором фазы $Pnmall$ и $Pnmall^*$ подавляются при 10% Mn^{4+} , в легированном барием соединении даже при 20% Ba их остается небольшое количество.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 09-02-00767-а и Программы РАН «Физика конденсированных сред».

Седых Вера Дмитриевна, с.н.с.
142432, Черноголовка, Моск. обл., ул. Академика Осипьяна, 2
E-mail: sedykh@issp.ac.ru

**НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНЫХ
СВОЙСТВ Pr_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}MnxO₃**

В.В. Сиколенко^{1,2)}, В.Ефимов²⁾, И.Троянчук³⁾, Д.Карпинский³⁾

¹⁾ *Технологический Институт Карлсруэ, Германия*

²⁾ *Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³⁾ *Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Белоруссия*

Структурные и магнитные свойства Pr_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}MnxO₃ были исследованы методом дифракции тепловых нейтронов. Было обнаружено, что при охлаждении от температур ниже комнатной происходит кристаллоструктурное превращение без изменения симметрии, для составов с $x > 0.5$ в рамках орторомбической пространственной группы Imma, для составов с $x < 0.5$ в рамках моноклинной группы I2/a. Фазовые превращения обусловлены активной ролью внутренних электронных оболочек празеодима в образовании химической связи. Представлена модель, описывающая поведение этих фаз.

Сиколенко Вадим Витальевич
141980, Дубна, Ул. Жолио-Кюри, д. 6
Тел.: 49621-64050; E-mail: Vadim.Sikolenko@jinr.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ, ЛЕГИРОВАННЫХ ВАНАДИЕМ: АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Ю.О.Смирнова¹⁾, А.А.Гуда¹⁾, Н.Ю.Смоленцев¹⁾, М.А.Солдатов¹⁾, Л.Н.Мазалов²⁾,
А.В.Солдатов¹⁾

¹⁾ *НОЦ «Наноразмерная структура вещества», Ростов-на-Дону*

²⁾ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

Дисульфиды хрома-меди являются суперионными проводниками при высоких температурах (больших 600°C) и обладают смешанной электрон-ионной проводимостью при комнатных температурах. Также они обладают интересными магнитными свойствами. В данной работе исследовались дисульфиды хрома меди, легированные ванадием $\text{CuCr}(1-x)\text{V}(x)\text{S}_2$, $x=0\div 0.4$.

Были сняты спектры рентгеновского поглощения вблизи К-края меди, ванадия и хрома. Также были теоретически рассчитаны XANES-спектры за К-краями меди, хрома и серы в чистом дисульфиде хрома меди CuCrS_2 методом полного многократного рассеяния, используя код FEFF 8.4, и методом конечных разностей (программный код FDMNES).

При легировании дисульфида хрома-меди ванадием возникают дефекты в кристаллической решетке, обуславливающие суперионную проводимость. Нами были рассмотрены два возможных дефекта решетки: дефект замещения и дефект междоузлия. Геометрическая оптимизация кристаллической решетки с дефектами была выполнена с помощью теории функционала плотности (программный код Wien2k). Был выполнен теоретический расчет спектров XANES за К-краем ванадия, меди, хрома и серы для оптимизированных структур методом полного многократного рассеяния.

Анализ теоретических и экспериментальных спектров XANES позволяет сделать выводы о том, какие дефекты преобладают при различных концентрациях ванадия в дисульфиде хрома-меди.

Смирнова Юлиана Олеговна
344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, Физический факультет, Южный Федеральный Университет
Тел.: 8(988)8985334; E-mail: juana1693@gmail.com

РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ НА ИСТОЧНИКАХ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ 3D АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ НАНО-БИО-МЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

А.В. Солдатов¹⁾, К. Asokan²⁾, В.П.Дмитриев³⁾, Г.Ю.Смоленцев^{1,4)}, М.А.Солдатов¹⁾,
Н.Ю.Смоленцев^{1,3)}, А.А.Гуда¹⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ Межуниверситетский ускорительный центр, Нью Дели, Индия

³⁾ Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

⁴⁾ Университет г. Лунда, Швеция

Описываются рентгеноспектральные методики определения параметров трехмерной наноразмерной атомной и электронной структур веществ в конденсированном состоянии, включая анализ спектров ближней области рентгеновского поглощения (XANES) с использованием методов многомерной интерполяции, анализ спектров рентгеновской эмиссии, в том числе для белков и жидкой фазе в мягкой области спектра и спектроскопии RIXS .

Представлен обзор результатов, полученных по данной методике для широкого класса материалов для nano-био-медицинских технологий таких как комплексы золота/ перспективные в качестве противораковых медицинских препаратов, нанокатализаторы, белки с активным металлическим центром, тонкие пленки материалов для спинтроники (разбавленные магнитные полупроводники типа ZnO:Mn, ZnO:C), а так же дефекты в облученных ионами кислорода полупроводниковых пленках GaN.

Используя многомасштабное компьютерное моделирование методами молекулярной динамики, теории функционала плотности, конечных разностей для решения уравнения Шредингера и зонной теории определены особенности взаимосвязи локальной атомной и электронной структур исследуемых классов материалов.

Исследование поддержано грантами ФЦП «Кадры» (госконтракт № 14.740.11.0886) и РФФИ 10-02-92658-ИНД_а.

Солдатов Александр Владимирович, зав. кафедрой
344090, Ростов-на-Дону ул.Р.Зорге, д.5
Тел.: (863)2975326; E-mail: soldatov@sfedu.ru

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ СЕГНЕТОКЕРАМИКИ ПОСЛЕ МЕХАНОАКТИВАЦИИ

Г.Б.Сухарина, А.В.Солдатов, К.Г.Абдулвахидов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Наноструктурированная сегнетокерамика – керамические материалы, которые используются, в качестве активных элементов во многих функциональных устройствах. Основными задачами при получении функциональной керамики является - воспроизводимость физических свойств и возможность целенаправленно управлять ими. Одним из возможных способов управления физическими свойствами является изменение концентрации структурных дефектов, реализуемое методами механоактивации и механохимии.

Целью данной работы являлось изучение локальной атомной структуры и электронных свойств сегнетокерамики $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ после механоактивации. Для того чтобы оценить изменения в структуре скандотанталата и изучить возможные типы точечных дефектов после механоактивации были измерены спектры рентгеновского поглощения ближней тонкой структуры XANES L_3 -краев свинца и тантала. Спектры снимались для чистого порошка данного соединения и порошка, подвергнувшегося сдвиговой деформации под действием давления 200МПа.

Теоретический анализ спектров L_3 -краев свинца и тантала в $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ проведен на основе “*ab initio*” самосогласованного метода полного многократного рассеяния, метода конечных разностей, а также полнопотенциального метода линейаризованных присоединенных плоских волн. Расчеты проводились с использованием программных комплексов FEFF8.4, FDMNES и Wien2k, соответственно. На основе анализа ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (XANES) за L_3 -краем тантала установлено, что в процессе сдвиговой деформации под действием давления 200МПа в удвоенной ячейке перовскита соответствующей $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ с наибольшей вероятностью реализуются дефекты типа: вакансия в позиции иона Sc.

Сухарина Галина Борисовна, м.н.с.

344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, д.5

Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2901003; E-mail: sukharina@mail.ru

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АДсорБИРОВАННЫХ МОНОСЛОЯХ НА ГРАНИЦЕ НАСЫЩЕННЫЙ УГЛЕВОДОРОД – ВОДА

А. М. Тихонов

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва

Сообщение посвящено исследованию макроскопически плоской границы (интерфейса), образованной двумя несмешивающимися жидкостями: насыщенным углеводородом (неполярный органический растворитель) и водой (раствор электролита). Оно позволило проверить предсказания ряда теоретических моделей строения поверхности жидкости, включая результаты молекулярно-динамических вычислений. В работе впервые методом рассеяния синхротронного излучения систематически изучено молекулярное строение и фазовые переходы в адсорбированных монослоях простейших липидов (алканолов и одноосновных карбоновых кислот) на границе алкан – вода. Использование синхротронного излучения для исследования этих систем оправдано тем обстоятельством, что яркость стандартного лабораторного рентгеновского источника не позволяет из экспериментальных данных извлечь информацию о строении межфазной границы с необходимым пространственным разрешением.

Согласно данным рассеяния адсорбированные на границе жидкостей молекулы поверхностно-активных веществ часто образуют пространственно неоднородную структуру, в которой сосуществуют домены двух однородных фаз. Обе фазы стремятся к перемешиванию, так как образование одномерных межфазных границ приводит к значительному понижению энергии. Очевидным следствием этого факта является невозможность двумерного фазового перехода первого рода, вместо которого на поверхности должна наблюдаться бесконечная цепочка фазовых переходов (критический кроссовер). В этом сообщении проведен анализ экспериментальных данных, позволивший установить критический показатель кроссовера на границе *n*-гексан – вода. Согласно оценке параметров критического кроссовера в адсорбированных монослоях алканолов на границе *n*-гексан – вода, все системы, в которых наблюдается это явление, характеризуются одним значением критического показателя ~ 1.8 .

По материалам докторской диссертации.

Тихонов Алексей Михайлович, д.ф.-м.н.
119334, Москва, ул. Косыгина, д. 2
Факс: 8(495)6512125 E-mail: tikhonov@kapitza.ras.ru

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ РЕНТГЕННОДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

С.С. Уварова¹⁾, О.М. Кугаенко ¹⁾, В.С. Петраков ¹⁾, Н.Ю. Табачкова ¹⁾, С. А. Крылов ¹⁾,
Т.Б. Сагалова ¹⁾, О.А. Бузанов ²⁾, В.Н. Егоров ²⁾, С.А. Сахаров ²⁾, А.Б. Коршунов ³⁾

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

²⁾ *«Фомос-Материалс», Россия*

³⁾ *МГУ им. Ломоносова, Россия*

Широкое применение кристаллов семейства лангасита ставит задачу исследования устойчивости работы кристаллических датчиков в условиях высоких температур и давлений.

Для исследования температурной устойчивости кристаллов семейства лангасита проведены высокотемпературные рентгенодифракционные исследования измельченных в порошок (дисперсностью не более 200мкм) монокристаллов (таблица 1). Измерения проводились на рентгеновском дифрактометре D8 Advance при симметричной съемке θ - 2θ с использованием $\text{CuK}\alpha$ излучения ($\lambda = 1,54178 \text{ \AA}$). Рентгеновскую съемку образцов проводили в вакууме

10^{-3} мбар при температурах от комнатной до 1200 °С с шагом 100 °С и выдержкой 1 час при каждой температуре.

Таблица 1 – Фазовый состав кристаллов при высоких температурах

Кристалл	Температура измерения, °С	Фазовый состав	
		Основной	Дополнительный
Лангасит	20+1000	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	Нет
	1200	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	$\text{La}(\text{GaO}_3)$ La_2O_3
Лангатат	20+1000	$\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$	Нет
	1200	$\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$	$\text{La}(\text{TaO}_4)$ $\text{La}(\text{GaO}_3)$ TaO_2
Лангатат, легированный алюминием	20+1000	$\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$	Нет
	1200	$\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$	$\text{La}(\text{TaO}_4)$ $\text{La}(\text{GaO}_3)$ TaO_2
Катангасит	20+1000	$\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	Нет
	1200	$\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	CaSiO_3 $\text{Ca}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$

Установлено, что фазовый состав всех исследуемых порошков стабилен при отжиге до температуры 1000 °С, при 1200 С обнаружены дополнительные фазы, что связано с изменением состава приповерхностных слоев с образованием легколетучего оксида GaO_{14}

Уварова Светлана Сергеевна
119049, Москва, Ленинский просп., д. 4
Тел.: 8(499)2366500; E-mail: crystalxxi@misis.ru

ЭВОЛЮЦИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА И СТРУКТУРЫ КЕРАМИКИ $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{TiO}_2$ С НАНОСТРУКТУРНЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ Al_2O_3

Т.М. Ульянова, Н.П. Крутько, Л.В. Титова, С.В. Медиченко, Л.В. Кульбицкая

Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси, Минск

В процессе термообработки тройной системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-TiO}_2$ образуются двойные соединения: муллит ($3\text{Al}_2\text{O}_3\cdot 2\text{SiO}_2$) и тиалит ($\text{Al}_2\text{O}_3\cdot \text{TiO}_2$), последний характеризуется анизотропией строения кристаллической решетки и низким значением термического коэффициента линейного расширения (ТКЛР), но отличается непрочностью, тогда как муллит повышает прочностные свойства материала. Целью настоящей работы было исследование эволюции структуры и формирования новых фаз при консолидации микрочастиц порошков с наноструктурным наполнителем Al_2O_3 в керамическом материале, а также установление корреляции микро- и кристаллической структуры формирующихся фаз с физико-механическими свойствами керамики. Исходные порошки имели следующий фазовый состав: глинозем - α - Al_2O_3 , TiO_2 – рутил, SiO_2 - α -кварц. Наноструктурный наполнитель представлял собой вискеры микронного размера, состоящие из нанозерен α - Al_2O_3 с примесью γ - и θ -фаз. При выполнении эксперимента использовались термический, электронно-микроскопический, рентгеновские: фазовый, структурный, флуоресцентный анализы, а также стандартные методы определения физико-механических и химических свойств порошков и керамических материалов. Исследовались твердофазные процессы на границе фаз, а также структурные и химические трансформации в композитах при нагревании от 1350 до 1500^oС. Установлено, что при взаимодействии волокнистого наноструктурного наполнителя с минеральной матрицей в области температур 1350 - 1450^oС в композите формировался жесткий каркас из тугоплавких волокон, макропоры которого заполнялись кристаллами образующегося муллита и расплавом силикатных стекломасс. С повышением температуры нагревания образовывался титанат алюминия. Причем, кристаллизация его происходила при взаимодействии расплава из стекломасс и глинозема. Наноструктурный наполнитель оксида алюминия активизировал твердофазные реакции образования муллита и тиалита и снижал температуру образования новых фаз на 50-100^oС. Полученный композит с добавкой наноструктурного Al_2O_3 прочнее в 2,5 - 3 раза матрицы без наполнителя.

Ульянова Татьяна Михайловна, в.н.с., к.х.н.
220072, Минск, ул. Сурганова, д.9, корп. 1;
Тел.: (375)173321636; E-mail: ulya@igic.bas-net.by

ТВЕРДОФАЗНАЯ АМОРФИЗАЦИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ Al_xGe_{1-x} МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ В РЕАЛЬНОМ МАСШТАБЕ ВРЕМЕНИ

В.К. Федотов, Е.Г. Понятовский

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

Работа посвящена дифракционному изучению процесса аморфизации метастабильных фаз высокого давления $Al_{1-x}Ge_x$ и сравнительному фазовому анализу этой системы по отношению к изученным ранее фазам $(GaSb)_{1-x}Ge_x$ [1]. Основной вопрос – что объединяет эти системы с одинаковым многостадийным характером аморфизации, и в каком виде картина неоднородной модели для сплава GaSb применима для новой системы Al-Ge.

С приложением высокого давления возрастает растворимость Ge в Al и образуются две новые промежуточные фазы вблизи составов 30 и 50 ат.% Al [2]. Методом закалки под давлением (9 ГПа и 300°С) эти фазы были получены при $P=1$ атм и $T=90K$ как метастабильные и изучены методом нейтронной дифракции на светосильной установке D1B (ИЛЛ, Гренобль). При медленном отогреве закаленной γ -фазы $Al_{32}Ge_{68}$ до комнатной температуры наблюдался процесс твердофазной аморфизации в реальном масштабе времени.

Было установлено, что процесс аморфизации γ -фазы идет более интенсивно после проведения вторичной термобарической обработки образца (после аморфизации) и отличие нейтронограмм связано с усилением процесса локального фазового расслоения сплава и выделением мелкодисперсной новой фазы $Al_{50}Ge_{50}$ и избыточного Ge. Найдены общие тенденции в поведении трех систем с нарастающей степенью сложности GaSb, $(GaSb)_{1-x}Ge_x$ и Al-Ge. Отмечена ключевая роль эффекта фазового расслоения элементоподобной структуры (типа β -Sn или простой гексагональной), который проявляется при высоком давлении во всех этих системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы РАН по секции “Физика сильно сжатого вещества”.

1. Федотов В.К. и др. Кристаллография, в печати
2. Бакалов О.И и др. ИФТТ, 1987, т.29, вып.7, стр.1975

Федотов Владимир Константинович
142432, Черноголовка, Московская обл., Институт физики твердого тела РАН
Тел.: 8(495)9628054; Факс: 8(496)5228160; E-mail: fedotov@issp.ac.ru

ОСОБЕННОСТИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В НОВОМ МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $GdFe_3(BO_3)_4$

К.В. Фролов, И.С. Любутин, О.А. Алексеева, И.А. Верин

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

Новые мультиферроидные соединения и природа наблюдаемых в них магнитоэлектрических эффектов вызывают значительный интерес исследователей в связи с широким спектром возможных применений подобных материалов. Недавно в новом мультиферроике $GdFe_3(BO_3)_4$ был обнаружен каскад магнитных и структурных фазовых переходов [1-3]. Однако взаимосвязь между магнетизмом и структурными свойствами соединения $GdFe_3(BO_3)_4$ остаётся неопределённой.

В данной работе представлены результаты исследования монокристалла $GdFe_3(BO_3)_4$ методами мессбауэровской спектроскопии (ядра ^{57}Fe) и рентгеноструктурного анализа в интервале температур 5 – 295 К. В отличие от ранее предложенного [2], мессбауэровские данные обнаруживают две неэквивалентные позиции ионов Fe во всей области температур 5 – 295 К. Обнаружены структурные и магнитные аномалии при температурах ниже точки Нееля ($T_N = 38.1$ К) и в области структурного фазового перехода ($T_S = 155$ К), что хорошо коррелирует с нашими рентгеноструктурными данными.

Температурные зависимости параметров элементарной ячейки $GdFe_3(BO_3)_4$ в интервале 30 – 295 К получены на четырёхкружном монокристалльном дифрактометре HUBER-5042, оборудованном криостатом замкнутого цикла DISPLEX DE-202. Обнаружено, что параметры a и b остаются практически неизменными до температуры $T_S = 155$ К, и затем резко уменьшаются в точке фазового перехода. При дальнейшем понижении температуры они уменьшаются по квадратичному закону. В тоже время параметр c линейно уменьшается с падением температуры до 155 К, а в районе 80 К его поведение аномально меняется.

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты № 11-02-00636а и 11-02-12089-офи-м.

1. R.Z. Levitin, et al., *JETP Lett*, **2004**, 79, 9, 423.
2. S.A. Klimin, et al., *Acta Cryst. B*, **2005**, 61, 481.
3. D. Fausti, et al., *Phys. Rev. B*, **2006**, 74, 024403.

Фролов Кирилл Владимирович
119333, Москва, Ленинский просп., д.59
Тел.: 8(495)3308329; Факс: 8(499)1351011; E-mail: green@ns.crys.ras.ru

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ ФУЛЛЕРЕНОВ.

С.С.Хасанов¹⁾, Д.В.Конарев²⁾

- 1) *Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*
- 2) *Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

В докладе рассматриваются структурные аспекты реализации магнитных и проводящих свойств в ионных соединениях фуллеренов, в которых за названные физические свойства ответственна подрешетка анионов фуллерена с той или иной топологией и конкретными геометрическими параметрами. К этим параметрам относятся межмолекулярные расстояния, взаимная ориентация и собственная деформация молекулы фуллерена, которая определяет расщепление трехкратно вырожденного LUMO и тем самым влияет на взаимодействие между соседями. Металлической проводимостью обладают комплексы, в которых подрешетка анионов фуллерена имеет однородную структуру. Обеспечение этой однородности при дизайне проводящих структур представляют собой непростую задачу. Были получены и исследованы кристаллы большого количества соединений с общей формулой $(D_A^+) \cdot (C_n^{m-}) \cdot (D_B) \cdot (P)$, где D_A – небольшая молекула катиона или сильного донора, способная ионизовать фуллерен, D_B – структурообразующая большая молекула, P – молекулы растворителя, C_n – C_{60} или C_{70} и m – их заряд. В докладе детально обсуждается, в частности, низкотемпературное поведение кристалла $(MDABCO^+) \cdot (C_{60}^{\bullet-}) \cdot TPC$, где TPC – нейтральная молекула триптицена, а $MDABCO^+$ – катион метилдиазабициклооктана, в котором имеется устойчивая фуллереновая конфигурация в виде плотноупакованных гексагональных слоев, обладающая металлической проводимостью [1].

1. Dmitri. V. Konarev, Salavat S. Khasanov, Akihiro Otsuka, Mitsuhiko Maesato, Gunzi Saito, Rimma N. Lyubovskaya, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 4829-4832.

К.ф.-м.н. Хасанов Салават Салимьянович
142432, г. Черноголовка Московской обл., ул. Академика Осипяна, 2, ИФТТ РАН
Тел.: (496) 522-83-68; Факс: (496) 522-81-60;
E-mail: khasanov@issp.ac.ru

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ И МАЛОУГЛОВЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

М.Д.Шарков, К.Ю.Погребницкий, М.Е.Бойко, С.Г.Конников

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

Трифилит LiFePO_4 и титанат лития $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ входят в число основных материалов, на которых базируется работа современных аккумуляторных батарей. Образцы трифилита и титаната лития исследованы методом спектроскопии EXAFS на основе данных, полученных на синхротронной установке РНЦ «Курчатовский институт». С помощью ранее разработанной нами методики [1] проведен анализ полученных спектров EXAFS. Сформулированы гипотезы о компонентном составе образцов.

На лабораторном приборе типа MAPS [2] зарегистрированы спектры EXAFS и малоугловые дифракционные картины исследуемых образцов трифилита и титаната лития. Проведено сравнение спектров EXAFS, полученных на синхротронной установке и на лабораторном приборе с источником UltraX-18HB. На основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния получены сведения о размерах доменов в исследуемых образцах. Для преодоления неоднозначности Бабине было использовано рентгеновское излучение с различной длиной волны вблизи края поглощения атомов железа и титана. Это позволило приписать полученные размеры к доменам, содержащим соединения железа и титана.

1. Погребницкий К.Ю., Шарков М.Д. // ФТП. – 2010. – №44. – Вып. 6. – С. 753–758.

2. Yuryev Yu.N., Lee H.J., Kim J.H., Cho Y.K., Lee M.K., Pogrebitsky K.Ju. // X-Ray Spectrometry. – 2008. – Vol. 37. – P. 476–481.

Шарков Михаил Дмитриевич, к.ф.-м.н., н.с.

194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д.26

Тел.: (812)2927985; Факс: (812)2971017; E-mail: mischar@mail.ioffe.ru

ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОЗОЛОТА ВНУТРИ ПОЛОСТЕЙ КУКУРБИТУРИЛА ПО EXAFS СПЕКТРАМ

С.Б.Эренбург¹⁾, С.В.Трубина¹⁾, Е.А.Коваленко¹⁾, О.А.Герасько¹⁾, В.И.Зайковский²⁾,
С.Г.Никитенко³⁾

¹⁾*Институт Неорганической Химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск*

²⁾*Институт Катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск*

³⁾*DUBBLE-CRG & ESRF, Гренобль, Франция*

Сравнительно недавно обнаружено, что при уменьшении размеров частиц до 5нм и менее золото проявляет высокую каталитическую активность. Уникальную возможность для получения однородных по размерам и форме наночастиц предоставляет семейство органических молекул состава $C_{6n}H_{6n}N_{4n}O_{2n}$ (CB[n]), $n = 5-10$), имеющих макроциклическую структуру и открытые гидрофобные внутримолекулярные полости.

В водно-этанольном растворе путем химического восстановления золото-хлористоводородной кислоты ($HAuCl_4$) боргидридом натрия ($NaBH_4$) проведен синтез соединений включения $Au@CB[7]$. Для синтезированных соединений измерены EXAFS- и XANES- спектры в районе L_{III} -краев поглощения Au. Спектры получены с использованием СИ накопителя ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН (Новосибирск) и канала DUBBLE центра ESRF (Гренобль, Франция). Размеры частиц золота и топология исследуемых систем контролировались с помощью просвечивающей электронной спектроскопии (HRTEM). Установлено, что для $Au@CB[7]$, полученного при достаточно низкой (10^{-4} моль/л) концентрации $HAuCl_4 + CB[7]$ в растворе, кластеры Au в полостях кукурбитурила ($h \sim 7 \text{ \AA}$, $d \sim 9 \text{ \AA}$) имеют меньшие (на $\sim 0.02-0.03 \text{ \AA}$) межатомные расстояния и заметно большие (в три раза при 12 K) значения фактора Дебая-Валлера по сравнению с массивным Au, а также координационные числа $N_{Au-Au} \leq 7$ и размеры $\sim 7 \text{ \AA}$. Из сравнительного анализа XANES спектров не обнаружено отличий в электронном состоянии такого золота от металлического. Для высокодисперсных образцов, полученных другими методами на различных носителях и содержащих несколько более крупные частицы золота, ранее установлены аналогичные изменения микроstructures [1].

1. S Erenburg, S Trubina, N Bausk, B Moroz, A Kalinkin, V Bukhtiyarov, S Nikitenko. Journal of Physics: Conf.Ser., 2009, v.190, 012121 doi:10.1088/1742-6596/190/1/012121

Эренбург Симон борисович

630090, Новосибирск, пр. Акад. Лаврентьева 3

Тел.: (383)3333166; Факс: (383)3309489; E-mail: simon@niic.nsc.ru

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ ВАНАДИЛФОСФАТОВ $\text{Rb}(\text{VO}_2)[\text{HPO}_4]$ и $\text{CsAl}(\text{VO})[\text{PO}_4]_2(\text{H}_2\text{O})$ ПО ДАННЫМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Е.В. Яковлева¹⁾, О.В. Якубович¹⁾, Я.М. Стил²⁾, О.В. Димитрова¹⁾,

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

²⁾ *Университет Чикаго, США*

Большой и устойчивый интерес к исследованию систем, содержащих оксокомплексы ванадия и фосфора, обусловлен, в частности, многообещающими каталитическими свойствами ванадилфосфатов. Большинство каталитически активных соединений такого рода являются продуктами температурного воздействия в контролируемых условиях давления на фосфатные фазы, содержащие атомы ванадия в степени окисления +5 или +4.

Рентгенографически (дифрактометр Bruker Smart, $T = 100$ К) уточнены кристаллические структуры двух ванадилфосфатов $\text{Rb}(\text{VO}_2)[\text{HPO}_4]$ (I) и $\text{CsAl}(\text{VO})[\text{PO}_4]_2(\text{H}_2\text{O})$ (II), полученных методом гидротермального синтеза в системах (I) $\text{RbCl} : \text{Rb}_3\text{PO}_4 : \text{VO}_2 : \text{H}_2\text{O} : a = 7.029(4), b = 9.513(6), c = 18.049(10)$ Å, пр.гр. *Pbca*, $Z = 8$, $\rho_{\text{выч.}} = 2.910(3)$ г/см³; и (II) $\text{AlCl}_3 : \text{Cs}_3\text{PO}_4 : \text{V}_2\text{O}_5 : \text{H}_2\text{O} : a = 8.0128(13), b = 8.0714(13), c = 14.118(2)$ Å, $\beta = 106.302(2)^\circ$, пр.гр. *P2₁/c*, $Z = 4$, $\rho_{\text{выч.}} = 3.295(1)$ г/см³. Локализованы атомы водорода, уточнены их координатные и тепловые параметры. Рассчитаны геометрические характеристики водородных связей и проанализирована их кристаллохимическая функция. Выявлены топологические и генетические связи изученных ванадилфосфатов с соединениями производных структурных типов.

Благодарим Российский Фонд Фундаментальных исследований за финансовую поддержку.

Яковлева Екатерина Владимировна
119991, Россия, Москва, Ленинские горы, д.1
Тел.: 8(926)8251881; E-mail: yakovleva.msu@gmail.com

ГИДРИРОВАННЫЕ НАНОТУБКИ: ИССЛЕДОВАНИЯ НА ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ МЕТОДОВ И DFT МОДЕЛИРОВАНИЯ

Г.Э. Яловега¹⁾, В.А. Шматко¹⁾, А.Ю. Ключин²⁾, А.В. Крестинин²⁾,
М.М. Бржезинская^{2),3)}

¹⁾ Южный федеральный университет, физический факультет

²⁾ Институт физики имени В.А. Фока, Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Санкт-Петербург, Россия

³⁾ ALBA Synchrotron Light Source, 08290 Barcelona, Spain

Рентгеновские C 1s-спектры поглощения (NEXAFS) и фотоэлектронные спектры (РФС) исходных (SWNT) и гидрированных одностенных углеродных нанотрубок (H-SWNT) были измерены с высоким разрешением на Российско-Германской линии источника синхротронного излучения БЭССИ II (Берлин, Германия). Наблюдались значительные изменения РФС исходных SWNT при гидрировании с концентрацией водорода 5.335 wt.%. Появление новых особенностей на спектрах H-SWNT в сравнении со спектрами SWNT может быть проинтерпретировано, как результат образованием углеродно-водородных химических связей, сопровождающихся переносом заряда между атомами C и H.

Сопоставление C 1s спектров NEXAFS SWNT+H5.3% со спектрами исходных SWNTs показывают значительное уменьшение интенсивности π-пика и появление новых структур вследствие электронных переходов с C 1s на свободные C 2p-состояния новой фазы, формирующейся в H-SWNTs вследствие гидрирования. Наблюдались изменения C 1s спектров поглощения SWNT+H5.3 во время отжига в диапазоне температур 275-530C.

Механизмы формирования C-F/C-H связей были исследованы на основе теории функционала электронной плотности (программный комплекс ADF2009.1).

Комплексный анализ на основе квантовомеханических расчетов, рентгеновской спектроскопии поглощения, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теоретического анализа рентгеновских спектров поглощения привел к детальному пониманию механизмов образования химической связи молекул водорода со стенками CNTs, изучить электронные свойства систем углеродная нанотрубка - молекула H.

Яловега Галина Эдуардовна, доцент

344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5

Тел.: (8632)975326; Факс: (8632)975120; E-mail: yalovega@sfned.ru

ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$: АНАЛИЗ ДАННЫХ XAFS СПЕКТРОСКОПИИ

А.А.Ярославцев^{1,2)}, А.П.Менушенков¹⁾, О.В.Гришина¹⁾, Р.В.Черников³⁾, А.Г.Кучин⁴⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *HASYLAB, DESY, Гамбург, Германия*

⁴⁾ *Институт Физики Металлов УрО РАН, Екатеринбург*

Впервые с помощью спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS) выше края поглощения K -Ce исследована перестройка локального окружения церия в зависимости от содержания марганца и температуры в магнитных интерметаллидах $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$. Одновременно при тех же условиях методом XANES- спектроскопии выше L_3 -края поглощения Ce изучено валентное состояние церия. Установлена корреляция между наблюдаемыми изменениями локальной электронной и кристаллической структур данных соединений и их магнитными свойствами. Спектры рентгеновского поглощения образцов $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$ $x=0,1,2$ были получены на линии C накопительного кольца DORIS III (DESY, Гамбург, Германия) выше краёв поглощения K -Ce (40443 эВ) и L_3 -Ce (5723 эВ). Использовались двухкристальный монохроматор (Si(311) для края K -Ce; Si(111) для края L_3 -Ce) и прокачной гелиевый криостат для низкотемпературных измерений. Обнаружены корреляции между температурными зависимостями радиусов координационных сфер вокруг атома Ce и параметрами решётки сплавов. При этом радиус ближайшей сферы, соответствующий межатомному расстоянию Ce-Fe(Mn), чувствует магнитное упорядочение в сплавах как общее для всего образца, так, возможно, и локальное в кластерах с ближним магнитным порядком. Показано, что расстояние между атомами железа в сплавах $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ и $\text{Ce}_2\text{Fe}_{15}\text{Mn}_2$ при низких температурах превышает критическое 2.45 Å, что приводит к ферромагнитному упорядочению системы. Валентность Ce практически не зависит от температуры, однако зависит от содержания Mn. Причём в ферромагнетиках $x=0,2$ её значение чуть выше, чем в антиферромагнетике $x=1$. Валентность характеризует степень гибридизации $3d$ и $4f$ электронных состояний, которая может сыграть роль в формировании магнитного состояния системы. Работа частично поддержана РФФИ (грант № 11-02-01174-а), ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" 2009-2013 годы (ГК № 16.740.11.0139) и УрО РАН (проект № 09-П-2-1008).

Ярославцев Александр Анатольевич, аспирант

115409, Москва, Каширское ш., д.31

Тел.: 8(495)3239386; Факс: 8(495)3242111; E-mail: yalex03@gmail.com

СЕКЦИЯ III

Структура и динамика трехмерных
систем

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ОБЛУЧЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ЛАНГАТАТА

М.М. Абдулов¹⁾, О.М. Кугаенко¹⁾, В.С. Петраков¹⁾, С.С. Уварова¹⁾,
О.А. Бузанов²⁾, В.Н. Егоров²⁾, С.А. Сахаров²⁾
А.Б. Коршунов³⁾

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

²⁾ *ОАО «Фомос-Материалс», Москва*

³⁾ *МГУ им. Ломоносова, Москва*

В связи с широким использованием пьезоэлементов из кристаллов лантан-галлиевого танталата (ГТЛ, $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$) ЛГТ в датчиках давления, вибрации и температурной градации актуальной становится задача исследования радиационной стойкости этих кристаллов.

Исследуется влияние электронного облучения на микротвердость кристаллов лантан-галлиевого танталата ($\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$) и влияние отжигов кристаллов после облучения на микроструктуру и механические свойства. Микротвердость измеряли по методу Кнупа на тонких пластинках ГТЛ X-среза, предназначенных для пьезоэлементов пьезодатчиков давления. Критический коэффициент интенсивности напряжений K_{Ic} , являющийся критерием трещиностойкости материала, измеряли при постановке отпечатков индентором Виккерса. Облучение проведено на электронном ускорителе с интегральным потоком электронов от 10^{11} до 10^{17} е/см². Микроструктура кристаллов исследована методом избирательного травления.

Микроструктура кристаллов ГТЛ при интегральном потоке электронов вплоть до $5 \cdot 10^{17}$ е/см² устойчива по отношению к электронному воздействию. Обнаружена зависимость микротвердости и микрохрупкости кристаллов от дозы облучения.

Абдулов Марсель Маратович
119049, Москва, Ленинский просп., д. 4
Тел.: 8(499)2366500; E-mail: crystalXXI@misis.ru

КРЕМНЕКИСЛОРОДНЫЕ НАНОТУБУЛЕНЫ В СТРУКТУРЕ СИЛИКАТА ЕВРОПИЯ И КАЛИЯ

С.М. Аксенов¹⁾, Р.К. Расцветаева¹⁾, Н.Б. Болотина¹⁾, В.К. Тароев²⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Институт геохимии СО РАН, Иркутск*

Рентгеноструктурным анализом ($12140 F > 3\sigma(F)$, $R=4.4\%$) изучены кристаллы силиката Еu и К, выращенные под руководством В.Л. Таусона гидротермальным методом в автоклавах при 500°C и давлении 100 МПа в течение 45 суток. Кристаллы до 1.5 мм прозрачные с кубической огранкой. Параметры моноклинной ячейки $a=27.6960(3)$, $b=7.0504(1)$, $c=14.2190(2)$ Å, $\beta=116.306(1)^{\circ}$, пр. гр. $C2/c$.

Основу кремнекислородного радикала составляют сильно гофрированные 8-членные кольца $[\text{Si}_8\text{O}_{24}]$, которые объединяются двумя «дополнительными» Si-тетраэдрами в трубчатые радикалы-нанотубулены $[\text{Si}_{10}\text{O}_{28}]$, тянущиеся вдоль кратчайшей оси b . Наноразмерные трубки укладываются вдоль периода c параллельно друг другу и объединяются вершинами боковых тетраэдров в слои $[\text{Si}_{10}\text{O}_{26}]$, параллельные (100). Слои через вершины «дополнительных» тетраэдров трубок объединяются в трехмерную псевдо-каркасную постройку $[\text{Si}_{10}\text{O}_{25}]$. В объединении нанотубуленов в трехмерную постройку участвуют и вершины Eu^{3+} -октаэдров с расстояниями Eu-O в пределах 2.300(1) - 2.325(1) Å. Атомы Eu расположены в шахматном порядке в центрах симметрии. Атомы К располагаются в стенках трубок в 7- и 8-вершинниках с расстояниями в пределах 2.651(1) - 3.406(1) Å. Нанотубулены имеют овальную форму сечения с минимальным и максимальным диаметрами 2.4 и 8.5 Å соответственно. В месте сближения 8-членных колец между двумя атомами O с валентными усилиями 1.45 в. е., отстоящими друг от друга на расстоянии 2.421(2) Å, формируются симметричные H-связи. Несмотря на то, что атомы водорода нами не локализованы, можно считать, что они располагаются в центре нанотрубок. Кристаллохимическая формула соединения $\text{HK}_6\text{Eu}^{3+}[\text{Si}_{10}\text{O}_{25}]$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 10-05-00092-а и 10-05-00344-а).

Расцветаева Рамиза Кераровна,
119333, Москва, ул. Ленинский просп., д. 59
Тел.: 8(499)1353400; E-mail: rast@ns.crys.ras.ru

**СТРУКТУРА И ОСОБЕННОСТИ ПОЛИМОРФИЗМА СОЕДИНЕНИЙ $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$,
ЛЕГИРОВАННЫХ ВАНАДИЕМ**

О.А.Алексеева¹⁾, А.М.Антипин¹⁾, Н.И.Сорокина¹⁾, И.А.Верин¹⁾, Е.П.Харитонов²⁾,
В.И.Воронкова²⁾

¹⁾*Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

Молибдат лантана $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ (LM) и легированные на его основе соединения LAMOX привлекают к себе внимание в связи с их высокой кислородной проводимостью ($6 \cdot 10^{-2}$ См/см). LM имеет фазовый переход первого рода при температуре близкой к 580°C и две фазы: низкотемпературную моноклинную α -фазу (P2₁) и высокотемпературную кубическую β -фазу (P2₁3) [1]. При исследовании серии керамических образцов $\text{La}_2\text{Mo}_{2-x}\text{V}_x\text{O}_9$ с различным содержанием ванадия было установлено, что при $x \geq 0.06$ стабилизируется кубическая и исчезает моноклинная фаза (подавляется основной переход $\alpha \rightarrow \beta$) [2].

В настоящей работе исследовано влияние замещения ионов Mo^{+6} ионами V^{+5} на структуру соединений LAMOX. В результате рентгеноструктурных исследований при температурах 293°C и 110°C двух монокристаллов β_{ms} -фазы состава $\text{La}_2\text{Mo}_{1.80}\text{V}_{0.20}\text{O}_{8.50}$ и $\text{La}_2\text{Mo}_{1.68}\text{V}_{0.32}\text{O}_{8.45}$ показано как внедрение примеси ванадия в структуру LM приводит к стабилизации кубической фазы при комнатной температуре. Установлено, что при введении в соединение $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ атомов ванадия происходит перераспределение валентных усилий в структуре LM, аналогичное тому, которое происходит при повышении температуры (создается более симметричное расположение кислородных ионов вокруг атомов молибдена), что способствует стабилизации при комнатной температуре кубической фазы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований ОФН РАН и ведущих научных школ (грант НШ-4034.2010.5).

1. Lacorre P., Goutenoire F., Bohnke O. et al. // Nature. 2000. V.404. P.856-858.

2. В.И.Воронкова, Е.П.Харитонов, А.Е.Красильникова // Кристаллография. 2010. Т.55. №2. С.306-312.

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПОРОШКОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИМ СИНТЕЗОМ

Л. А. Алешина, А. Д. Фофанов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

Нанопорошковые материалы, полученные плазмохимическим синтезом, были предоставлены Институтом теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН (Новосибирск). Ими являлись оксиды алюминия, циркония, титана и кремния, а также чистого кремния и нитрида кремния.

Рентгенограммы были получены в камере Гинье и на дифрактометрах ARL X'TRA и ДРОН-6. Анализ картин рассеяния проводился методом Ритвельда и методом Уоррена-Финбака. Для образцов, дающих картины, характерные для поликристаллов, рассчитывались и анализировались размеры ОКР.

Образцы оксидов алюминия в зависимости от условий синтеза были либо аморфными с включениями кристаллов γ - Al_2O_3 и корунда, либо состояли из двух мелкодисперсных фаз γ - Al_2O_3 : кубической и тетрагональной.

Нанопорошковые оксиды титана давали рентгенограммы, характерные для поликристаллов. Фазовый анализ показал, что они включают в себя 83% анатаза и 17 % рутила.

Нанопорошковые оксиды кремния давали диффузные дифракционные картины, отличающиеся от таковых для плавленного кварца. Наряду с расчетом координационных чисел и радиусов координационных сфер атомные модели их построены методами компьютерного моделирования.

Дифракционные картины нанопорошкового кремния имеют вид, характерный для поликристаллов, в зависимости от условий синтеза их цвет изменяется от светлокоричневого до коричневого и уменьшаются размеры ОКР.

Рентгенограмма образца, полученного плазмохимическим синтезом тетрахлорида кремния SiCl_4 с аммиаком NH_3 , на начальном этапе синтеза соответствовала рассеянию поликристаллом хлорида аммония и аморфной фазой. После термообработки образовывался рентгеноаморфный нитрид кремния.

Алешина Людмила Александровна, профессор
185030, Петрозаводск, пр. Ал. Невского, д.63
Телефон (+7) 8142 577762; E-mail: aleshina@psu.karelia.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ НА ОСНОВЕ РУТЕНИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

И.Г. Альперович¹⁾, А.В.Солдатов¹⁾, М. Душе²⁾, Ю.Н.Пушкарь²⁾

¹⁾ *Физический факультет, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

²⁾ *Department of Physics, Purdue University, West Lafayette, IN, USA*

Рутений-содержащие координационные соединения, такие как "голубой димер" ("blue dimer" в англ. лит-ре), способны катализировать реакции расщепления воды, происходящей в природе в процессе фотосинтеза, и могут быть использованы в будущих устройствах для накопления и передачи солнечной энергии. Спектроскопия рентгеновского поглощения (РСП) вблизи края поглощения (XANES) является эффективным методом для исследования электронных свойств молекул. Мы исследовали Ru L_{2,3} спектры XANES "голубого димера" и модельной молекулы гексоаминорутения. Эксперименты были проведены на синхротроне APS Аргоннской национальной лаборатории, шт. Чикаго, США. Для получения экспериментальных спектров при столь низких энергиях была разработана специальная камера с He атмосферой, позволяющая сохранить образцы при низкой температуре в непрерывном потоке жидкого азота.

Для получения информации об электронной структуре Ru, мы провели теоретический анализ спектров. Особой интерес в полученных экспериментальных данных представляет разница между L₂ и L₃ краями (соответствующими возбуждениям 2p_{1/2} и 2p_{3/2} остовных электронов Ru, соответственно). Это нетипичное для L_{2,3}-спектров отличие содержит информацию о симметрии вокруг атома-поглотителя и не может быть воспроизведено популярными одноэлектронными программами FEFF9.05 и FDMNES2010. Поэтому был разработан другой подход, основанный на релятивистской теории функционала плотности (ZORA DFT в англ. лит-ре), который обеспечивает превосходное согласие с экспериментальными спектрами. Это позволило нам интерпретировать изучаемые спектры, проанализировать электронную структуру рутения и сделать вывод, что релятивистские эффекты являются главной причиной особенностей XANES у Ru L-края по сравнению с мультиплетными эффектами, чья роль подчеркивалась в литературе ранее.

Альперович Игорь Гарриевич

344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге 5, Южный Федеральный Университет

Тел.: (863)2975326; E-mail: igor.alper@gmail.com

МОРФОЛОГИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ ГЕТИТА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

А.Н. Антонов¹⁾, А.А.Новакова^{1,4)}, Т.С. Гендлер²⁾, В.В. Левина³⁾, Е.А. Колесников³⁾,
И.И. Пузик³⁾

¹⁾ Московский Государственный Университет им. Ломоносова, Москва

²⁾ Институт Физики Земли РАН, Москва

³⁾ Московский Институт Стали и Сплавов

⁴⁾ Институт микро-наноэлектроники РАН

Для получения монодисперсного порошка наночастиц гетита (α -FeOОН) в процессе химического осаждения из соли железа и щелочи в водный раствор добавлялись различные поверхностно-активные вещества (ПАВ) с концентрацией 0.3% и 1%: $C_{12}H_{25}NaO_4S$ (анион-активный), $C_{12}H_{38}ClN$ (катион-активный) и ЭДТА $C_{10}H_{14}O_8N_2Na_2$ (комплексон). Исследование с помощью просвечивающей электронной микроскопии и мессбауэровской спектроскопии показало, что добавление 0.3% ПАВ увеличивает количество мелких частиц размером 2-5 нм по сравнению с нанопорошком гетита, полученного без применения ПАВ [1]. Однако добавление ПАВ с концентрацией 1% по-разному влияет на распределение размера частиц: в случае катион-активного ПАВ наблюдаются только мелкие частицы с размером 2-5 нм, в то время как в случае анион-активного ПАВ и комплексона происходит рост хорошо окристаллизованных частиц гетита с размерами порядка 100×20 нм.

Таким образом, анион-активный ПАВ и особенно комплексон ЭДТА при концентрации 1% выступают уже как катализаторы роста кристаллов гетита. Так как во время синтеза в растворе пространственно протяжённые молекулы ПАВ взаимодействуют с поверхностью зарождающихся частиц гетита, это может способствовать слипанию зародышей гетита и последующему увеличению размеров частиц и их кристаллизации.

Кроме того, в результате взаимодействия молекул ПАВ с атомами поверхности частиц гетита происходит комплексообразование. Во время проведения термомангнитного анализа, при котором образцы нагревались до $700^\circ C$ на воздухе в магнитном поле 400 мТ, на термомангнитных кривых наблюдались пики намагниченности в области температур 200-500 $^\circ C$. Такие пики нехарактерны для нагрева на воздухе нанопорошка чистого гетита и могут быть результатом того, что комплексы, образовавшиеся на поверхности частиц гетита, превращаются в магнитные соединения.

1. Journal of Solid State Phenomena 2011, Vol. 170, p.139-143

Антонов Александр Николаевич
119234, Москва, ул. Ленинские горы, д.1
Тел.: (495)9391226; E-mail: sasha-ant1987@yandex.ru

МЕЗОСТРУКТУРА АМОРФНЫХ КСЕРОГЕЛЕЙ ГИДРАТИРОВАННОГО TiO_2

А.Е. Баранчиков¹⁾, В.К. Иванов¹⁾, Г.П. Копица²⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва*

²⁾ Учреждение Российской академии наук *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН, Гатчина*

Подходы фрактальной геометрии в последние годы нашли широкое применение в различных областях неорганической химии и материаловедения для описания сложных систем, которые обладают скейлинговой симметрией, т.е. самоподобием компонентов в определенном интервале линейных размеров. В ряде исследований показано, что параметры фракталов, в частности, шероховатость поверхности могут определять многие физические и физико-химические свойства функциональных материалов, в том числе сорбентов и катализаторов.

Целью настоящей работы явилось исследование влияния условий синтеза (состав реакционной среды и pH осаждения) на мезоструктуру ксерогелей гидратированного диоксида титана, которые являются прекурсорами для получения фотокаталитических материалов с улучшенными характеристиками. В качестве основного метода исследования мезоструктуры был использован метод малоуглового рассеяния нейтронов.

Показано, что фрактальная размерность поверхности раздела фаз D_S аморфных ксерогелей $\text{TiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, полученных в кислой среде ($\text{pH} < 7$), резко возрастает с ростом pH. Переход от слабокислой ($\text{pH} = 6$) к слабощелочной среде ($\text{pH} = 8$), напротив, способствует значительному понижению величины D_S . Это явным образом свидетельствует о существенной зависимости характера агрегации данных ксерогелей от pH среды осаждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (10-03-01187-а и 11-03-12085-офи-м).

Баранчиков Александр Евгеньевич
119991, Москва, Ленинский пр-кт, д. 31
Тел.: 8(495)6338534; E-mail: a.baranchikov@yandex.ru

ОБ ИЗОМОРФНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПЕРЕХОДАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ В Zr И ЭКВИАТОМНОМ СПЛАВЕ TiZr

И.О. Башкин, В.К. Федотов, Е.Г. Понятовский

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

Обнаружение изоморфного фазового перехода первого рода в β -фазе циркония и в ω -фазе сплава TiZr при высоких давлениях и утверждение об электронном характере перехода [1,2] вызывало широкий интерес. В данной работе мы приводим данные дифракционного исследования поведения Zr при давлениях до 71 ГПа на синхротронном источнике ESRF (ИЛЛ, Гренобль) и анализируем материалы измерений [2] на сплаве TiZr для подтверждения факта расслоения ω -фазы сплава TiZr под давлением, что предлагалось в работе [3].

Дифракционное исследование Zr показало, что при 32 ГПа и комнатной температуре гексагональная ω -фаза превращается в кубическую β -фазу, структура которой сохраняется вплоть до максимальных давлений 71 ГПа при непрерывном изменении объема ячейки. Наблюдается линейный рост объемного модуля K_0 от 200 до 360 ГПа без скачка объема ниже 60 ГПа, о котором сообщалось ранее [1]. Вместо изоморфного перехода первого рода мы обнаружили аномалии производной объемного модуля, что может быть признаком перехода второго рода.

В результате обработки дифракционных данных, полученных на эквИАТОМНОМ сплаве TiZr при высоких давлениях, мы подтверждаем заключение о его распаде на два сплава разного состава Ti_xZr_{1-x} , сделанное по результатам длительных выдержек при меньших давлениях [3], снимая тем самым вопрос об изоморфном электронном переходе первого рода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы РАН "Теплофизика и механика интенсивных импульсных воздействий".

1. Yuichi Akahama et al. J. Phys. Soc. Japan. 1991, 60, 10, 3211
2. V.P. Dmitriev et al. Phys. Rev. B, 73, 094114, (2006)
3. И.О. Башкин и др. Физика твердого тела, 2008, т.50, вып.7, стр.1285

Башкин Игорь Олегович
142432, Черноголовка, Московская обл., Институт физики твердого тела РАН
Тел.: 8(496)5225369; Факс: 8(496)5228160; E-mail: bashkin@issp.ac.ru

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОРФОЛИДА КАРБАМИНИЛТИОГЛИКОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ

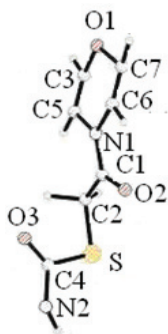
З.Ф.Бекнозарова , З.Каримов

Ташкентский институт ирригации и мелиорации

Продолжая изучения реакции анилидов с хлоруксусной кислоты в присутствии роданистого аммония для получения анилидов карбаминилтиогликолевой кислоты, синтез фосфорсодержащих аналогов являются интересными объектами и актуальными ввиду их малоизученности и больших возможностей для синтеза соединений с потенциальной пестицидной активностью.

Для изучения пестицидной активности нами синтезированы ариламида, гетериламида карбаминилтиогликолевой кислоты взаимодействием соответствующих amino соединений с монохлоруксусной кислотой и роданистым аммонием в среде органического растворителя. Среди этих соединений выявлены вещества, обладающие гербицидными и дефолирующими свойствами.

С целью выявления корреляции между строением и физиологической активностью, провели рентгеноструктурное исследование морфолидакарбаминилтиогликолевой кислоты.



Рассмотрены конформация и упаковка молекул морфолидакарбаминилтиогликолевой кислоты, Конформация морфолинового кольца- искаженное кресло, длины связи и величины валентных углов обычные. Межатомные расстояния S – C(2) 1,798 Å, и S – C(4) 1,811 Å. Молекулы объединены водородными связями N(2) – O(1) 2,93 Å, C(2) – O(3) 2,82 Å.

Замира Фармоновна Бекнозарова
100000, Ташкент, ул. Кары-Ниязий, д.39
Тел.: 2371913; E-mail: zokir_k@mfil.ru

ОПЫТ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ЖЕЛЕЗИСТЫХ КВАРЦИТОВ КОСТОМУКШСКОГО РУДНОГО РАЙОНА

Б.З. Белашев¹⁾, В.Я Горьковец¹⁾, М.Б. Раевская¹⁾, И.А. Бурлаков²⁾

¹⁾ Институт геологии Карельский научный центр РАН, Петрозаводск.

²⁾ Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск.

Костомукшский железорудный район – крупнейший на Фенноскандинавском щите. Костомукшский обогатительный комбинат производит железорудные окатыши для металлургической промышленности. Режимы обогащения руд и производства окатышей определяет качество сырья. Их оптимизация требует предварительной оценки характеристик руд. Задача актуальна при исчерпании одних и разработке других участков месторождений. В этой связи предпринято изучение структурных и магнитных свойств железистых кварцитов Южно-Корпангского участка, Корпангского и Костомукшского месторождений, и их сравнение со свойствами сырья на других участках.

Месторождения сложены метаморфизованными осадочными комплексами позднего архея гимольской серии возрастом 2.85-2.75 млрд. лет. Рудные зоны представлены телами магнетитовых кварцитов в ассоциации со слюдистыми и углеродсодержащими сланцами. Протяженность рудных тел достигает 20 км, мощность – до 400 м. Содержание магнетита в мелко и крупнозернистых рудах составляет 20-65 %, средняя концентрация железа - 32.2%.

Свойства железистых кварцитов изучали, применяя методы определения состава, электронную микроскопию, рентгеноструктурный анализ. Особое внимание было уделено методам измерения магнитных свойств железистых кварцитов: ЯГР-спектроскопии, каппаметрии, определению точки Кюри.

По характеристикам железистых кварцитов на исследуемых участках и месторождениях выделены зоны повышенного содержания магнетита.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО $\text{SrCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-z}$ ПЕРОВСКИТА

И.В.Беленькая¹⁾, С.В. Черепанова²⁾, А.П.Немудрый¹⁾

¹⁾Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

²⁾Институт катализа СО РАН, Новосибирск

Нестехиометрические перовскиты на основе феррита и кобальтита стронция обладают высокой смешанной кислород - электронной проводимостью и являются перспективными материалами для создания кислород-проницаемых мембран. Рекордные значения кислородной проницаемости имеет материал состава $\text{SrCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-z}$. В связи с этим интерес представляет изучение структуры и ее особенностей, определяющих аномально высокую подвижность ионов кислорода в данном соединении. Целью работы является исследование строения и микроструктуры $\text{SrCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-z}$ перовскита, в том числе в условиях, моделирующих рабочие условия каталитического мембранного реактора.

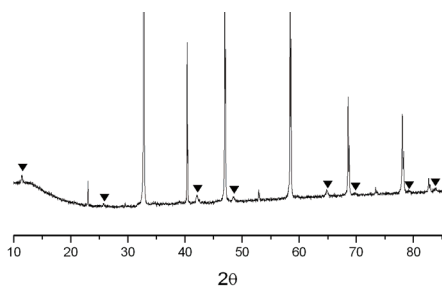


Рис.1. Рентгенограмма соединения $\text{SrCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-z}$

Рентгенограмма исследуемого соединения характеризуется наличием узких интенсивных рефлексов, принадлежащих структуре кубического перовскита, а так же наличием слабоинтенсивных диффузных максимумов (рис.1, отмеченных треугольниками), полуширины которых указывают на наличие наноразмерных областей. С помощью моделирования дифракционных картин по формуле Дебая показано, что наличие диффузных максимумов связано с одномерным беспорядком вдоль оси с, чередованием наноразмерных слоев вакансионно-упорядоченных фаз. С помощью *in situ* высокотемпературной рентгенографии и Мессбауэровской спектроскопии изучена эволюция структуры исследуемого образца от температуры.

Беленькая Ирина Викторовна
630 128, Новосибирск, ул.Кутателадзе, д.18
Тел.: (383)3363832; E-mail: vesnina.i@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЭВОЛЮЦИИ В АМОРФНЫХ ФУЛЛЕРИТАХ C₆₀, C₇₀

П.А. Борисова, С.С. Агафонов, В.П. Глазков, В.А. Соменков

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Целью настоящей работы является выявление фазовых переходов и нахождение температуры стабильности молекул, при изучении температурной эволюции молекулярной фазы аморфных фуллеритов дифракционными методами.

Исследование проводили методами: нейтронной и рентгеновской дифракции, дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и электронной просвечивающей микроскопии. С помощью механоактивации (размола в шаровой мельнице типа Fritsch) в образцах кристаллических фуллеритов C₆₀ и C₇₀ было достигнуто аморфное (мелкокристаллическое) состояние.

Установлено, что температурная эволюция аморфных (мелкокристаллических) фуллеритов C₆₀, C₇₀ сопровождается переходом из молекулярной фазы в атомарную. При температурах от 950 до 1400 °С в наноразмерных структурах происходит переход между стабильными состояниями: аморфным фуллеритом и аморфным графитом, через промежуточную алмазоподобную (метастабильную) или графеноподобную (квазидвумерную) фазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 09-02-00464а, № 10-02-00176а).

Борисова Полина Алексеевна, аспирантка
123098, Москва, пл.Академика Курчатова, д.1
Тел.: (499)1969908; E-mail: borisovapa@mail.ru

ОБРАЗОВАНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ТВЕРДОГО РАСТВОРА ЗАМЕЩЕНИЯ $\text{NiMn}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$

С.М. Бусурин, Д.Ю.Ковалев, М.Л.Бусурина, Ю.Г.Морозов

*Российская академия наук Институт структурной макрокинетики и проблем
материаловедения РАН, Черноголовка, Московская обл.*

Синтез ферритов с переменным составом ряда $\text{NiMn}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ проводился в порошковых системах насыпной плотности при комнатной температуре в атмосфере воздуха с применением простых оксидов и металлического порошка железа методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Продукты синтеза представляли собой хрупкий спек черного цвета для всей серии образцов с $x = 0 \div 1.0$, при этом имели место различия в фазовом составе синтезированных ферритов, тогда как основной фазой оставалась ферритовая фаза. Также на всех дифрактограммах присутствовали следы железосодержащей фазы Fe_2O_3 и продукта разложения перхлората NaCl . После промывки водой рефлексы NaCl на дифрактограмме не обнаруживались. Fe_2O_3 является промежуточным продуктом, который участвует в формировании ферритовой фазы, появление данного оксида связано, по-видимому, с не полной стабилизацией продукта и возникновением некоторой химической неоднородности, причиной которой является восстановление исходного компонента NiO до металлического никеля, причем количество Ni возрастает с ростом x . В тоже время высокотемпературный отжиг при 1270 К в течение 50 мин приводит к полной стабилизации продукта и выравниванию химического состава для всех полученных материалов. После такой термообработки продукт становится полностью однофазным и представляет собой порошок феррита $\text{NiMn}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$. Причем с увеличением значения x период решетки плавно увеличивается. Поскольку феррит никеля по типу расположения катионов относится к обращенным шпинелям, т.е. когда ионы Fe^{3+} занимают и окта- и тетрапоры в элементарной ячейке феррита, то ионы марганца, замещающие ионы железа в этих позициях увеличивают параметр решетки, за счет большего ионного радиуса, как в случае Mn^{2+} , так и в случае Mn^{3+} .

Бусурин Сергей Михайлович, н.с.

142432, Московская обл., г. Черноголовка ул.Институтская, д.8
Тел.: (49652)46317; Факс: (49652)46222; E-mail: busurin@ism.ac.ru

НЕИНВЕРСИОННОЕ СМЕЩЕНИЕ ГРАНЕЙ ОКТАЭДРА В СТРУКТУРЕ И ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

Т.Ф. Веремейчик

Институт кристаллографии РАН, Москва

Неинверсионный поворот на угол φ граней октаэдра 1а структуры кристаллов семейства лангасита, как предполагают, вызывает их оптическую активность.

Показано, что для кристаллов LGN, LGT, CGG, LGS, SGG величина угла φ пропорциональна удельному вращению ρ плоскости поляризации. При этом взаимодействие катионов через общие ребра полиэдров и отталкивание ионов O^{2-} формируют величину угла в корреляции с отношениями $(O3-O3)/(O2-O2)$ для расстояний между ионами O^{2-} и $h/(O3-O3)$, где h – высота октаэдра 1а (табл., ис-

	LGN	LGT	CGG	LGS	SGG	
φ , град	19.7	19.5	18.6	17.7	12.3	пользованы структурные данные [1-3]). Величина $h/(O3-O3)$ характеризует наклон поворота псевдо спирали к ее оси. Минимальные для LGS значения ρ и разности показателей преломления $n_e - n_o$ при не минимальном угле φ обусловлены сжатием додекаэдра 3e по направлению a (a/c минимально) и уменьшением разности поляризуемости додекаэдра 3e по a и c . Показаны стабильность относительных размеров октаэдра 1а и тетраэдра 3f (табл., $\beta_1 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(1a)$, $\beta_2 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(3f)$, $\beta_3 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(2d)$) и кристаллохимическое подобие LGS и CGG. Поэтому изменение размеров полиэдров, в том числе, из-за смешанных позиций, приводит к вращению тетраэдра 3f и общих с октаэдром вершин O3. Кроме того, на начальной стадии кристаллизации это может, как слабое возмущение неустойчивой системы, влиять на знак вращения.
$(O3-O3)/(O2-O2)$	0.71	0.71	0.69	0.69	0.65	
$h/(O3-O3)$	0.92	0.92	0.91	0.90	0.88	
ρ , град/мм [4]	21.9	-	14.6	3.6	13.9	
$n_e - n_o$ [4]	0.0304	0.0261	0.0240	0.0114	0.0171	
a/c	1.61	1.61	1.62	1.60	1.64	

пользованы структурные данные [1-3]). Величина $h/(O3-O3)$ характеризует наклон поворота псевдо спирали к ее оси. Минимальные для LGS значения ρ и разности показателей преломления $n_e - n_o$ при не минимальном угле φ обусловлены сжатием додекаэдра 3e по направлению a (a/c минимально) и уменьшением разности поляризуемости додекаэдра 3e по a и c . Показаны стабильность относительных размеров октаэдра 1а и тетраэдра 3f (табл., $\beta_1 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(1a)$, $\beta_2 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(3f)$, $\beta_3 = r_{cp}(3e)/r_{cp}(2d)$) и кристаллохимическое подобие

$\beta_1 \quad \beta_2 \quad \beta_3$

LGN	1.3	1.4	1.4
LGT	1.3	1.4	1.4
LGS	1.3	1.4	1.5
CGG	1.3	1.4	1.5
SGG	1.4	1.5	1.5

LGS и CGG. Поэтому изменение размеров полиэдров, в том числе, из-за смешанных позиций, приводит к вращению тетраэдра 3f и общих с октаэдром вершин O3. Кроме того, на начальной стадии кристаллизации это может, как слабое возмущение неустойчивой системы, влиять на знак вращения.

1. Дудка А.П., Милль Б.В., Писаревский Ю.В. // Кристаллография. 2009. Т.54. №4. С. 599.

2. Dudka A. P. // J. Appl. Cryst.. 2010/ V. 43. P. 1440.

3. Дудка А. П., Симонов В.И. // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 6. С. 00.

4. Калдыбаев К.А., Константинова А.Ф., Перекалина З.Б. Гиротропия одноосных поглощающих кристаллов. М.: ИСПИН, 2000. 294 с.

Веремейчик Тамара Федоровна, д.ф.-м.н.

119333, Москва, Ленинский просп. д.59

Тел.: 8(499)1355120; Факс: 8(499)1351011; E-mail: vtam@ns.crys.ras.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОХЕЛАТОВ КОБАЛЬТА, НИКЕЛЯ И МЕДИ МЕТОДОМ EXAFS

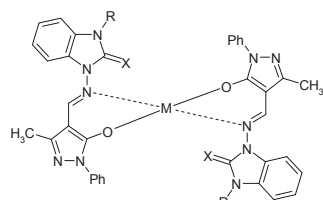
В.Г.Власенко¹⁾, В.В.Чесноков²⁾, А.И.Ураев²⁾, А.С.Бурлов²⁾, Я.В.Зубавичус³⁾,
Е.В.Коршунова²⁾, Т.А.Кузьменко²⁾

¹⁾ НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

²⁾ НИИ ФОХ Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

³⁾ КЦСИ и НТ, РНЦ «Курчатовский институт», Москва

Методом рентгеновской спектроскопии поглощения произведено исследование локальной атомной структуры серии новых металлохелатов



M= Co, Ni, Cu; R= CH₃, H
X= H, S, Se

кобальта, никеля и меди, синтезированных на основе азометинов 1-аминобензимидазолов и 1-фенил-3-метил-4-формил-5-пиразолон.

Рентгеновские Co, Ni, Cu K-спектры поглощения получены в режиме пропускания на EXAFS-спектрометре станции «Структурного материаловедения» в Курчатовском синхротронном

центре (г. Москва).

На основе анализа XANES и EXAFS исследованных металлохелатов определена геометрия координационного узла и получены параметры локального атомного окружения ионов металлов в этих соединениях (расстояния M-L(лиганд), координационные числа и факторы Дебая-Валлера). Показана важная роль в координации дополнительных донорных центров X при иминном атоме азота заместителя R аминокбензимидазола. При R= CH₃ координация дополнительных донорных атомов X=S, Se осуществляется, а при R= H такой координации нет.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 10-03-00434, 11-03-00475а, МК-170.2011.3.

Власенко Валерий Григорьевич, зав.лаб.

344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, д.194

Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: vlasenko@ip.rsu.ru; v_vlasenko@rambler.ru

ЗНАКОПЕРЕМЕННЫЙ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МАГНИТОВЯЗКОМ СПЛАВЕ $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$

М.Н. Волочаев¹⁾, Л.И. Квеглис²⁾, В.В. Казанцева²⁾

¹⁾ Сибирский государственный аэрокосмический университет, Красноярск

²⁾ Сибирский федеральный университет, Красноярск

В образцах сплава $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$, известного как антиферромагнитный инвар, после ударного динамического нагружения обнаружен эффект магнитного последствия. В таких образцах обнаружен знакопеременный термоэлектрический эффект. При нагревании образец ведет себя как термопара, т.е. разность потенциалов в некоторых точках образца возрастает с ростом температуры и может изменять знак (рис. 1). В работе обсуждается вопрос о причине появления знакопеременного термоэлектрического эффекта в сплаве $\text{Fe}_{86}\text{Mn}_{13}\text{C}$. Выявляется связь

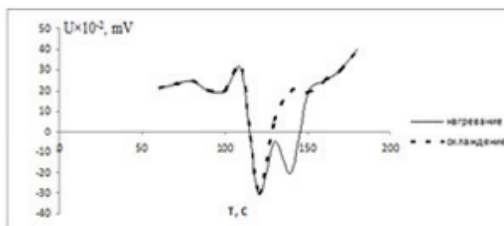


Рис. 1. Зависимость ЭДС от температуры.

кристаллической структуры с механическими, электрическими и магнитными свойствами.

При исследовании структуры и фазового состава образцов использовали методы рентгеноструктурного анализа сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, магнитометрические методы.

Причина магнитной вязкости в сплаве связывается с сосуществованием наноразмерных пластин антиферромагнитного аустенита и ферромагнитного мартенсита деформации.

Образование мартенситной фазы происходит за счет механохимических реакций с образованием структур Франка-Каспера.

Природу появления знакопеременного термоэлектрического эффекта можно объяснить с позиции сосуществования в образцах неоднородностей, приводящих к фрустрированной магнитной структуре.

Фрустрированная магнитная структура может изменяться за счет изменения плотности электронных состояний в зависимости от температуры

Волочаев Михаил Николаевич

660027, Красноярск, пр. Красноярский рабочий, д.26, кв.53

Тел.: 8(391)2229653; +79607745549; E-mail: volochaev91@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СУПЕРПРОТОННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В КРИСТАЛЛЕ $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$

В.В. Гребенев, Д.А. Ксенофонтов, В.В. Долбина

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Кристаллы $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ в настоящее время являются единственным известным представителем семейства $M_9H_7(AO_4)_8 \cdot xH_2O$ и относятся к семейству кристаллов $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4$; $X = S, Se, P, As$). Для подобных соединений характерно наличие фаз с высокой протонной проводимостью, реализующихся в результате суперпротонных фазовых переходов при относительно невысоких температурах. Известно, что аномалии физических свойств могут быть связаны и с диффузией кристаллизационной воды, например в кристаллах $Cs_5H_3(AO_4)_4 \cdot xH_2O$ ($A = S, Se$) [1]. Исследования диффузионных процессов в данном семействе являются достаточно актуальными, так как эти процессы могут существенно влиять на температурное поведение свойств кристаллов и приводить к стабилизации состояний с высокой проводимостью.

В настоящей работе исследована кинетика фазового перехода при $T_{sp} = 398$ К [1] и особенности перехода связанные с выходом из кристалла молекулы кристаллизационной воды. На основе анализа структурных особенностей [2] и анизотропии проводимости в суперпротонной фазе кристалла сделано предположение о том, что за счет разных носителей заряда – H^+ и K^+ формируется анизотропия проводимости. Полученные данные позволяют сделать вывод, что проводимость кристаллов $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ при повышении температуры обеспечивается диффузией кристаллизационной воды, движением ионов калия и протонами, образующими динамически разупорядоченную сетку водородных связей. Стабилизация высокотемпературной суперпротонной фазы и переохладение ее до низких температур обусловлены медленной диффузией и необходимостью нового перераспределения связей в кристалле при обратном вхождении молекулы воды в структуру.

1. Baranov A.I., Sinitsyn V.V., Vinnichenko V.Yu. et al. // Solid State Ionics. 1997. V. 97. P. 153.

2. И. П. Макарова, Т. С. Черная, В. В. Гребенев и др. Исследование структуры и свойств монокристаллов $K_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ // Кристаллография (принято в печать 2011 г.).

Гребенев Вадим Вячеславович, к.ф.-м.н.

119333, Москва, Ленинский просп., д.59

Тел.: 8(495)3307856; Факс: 8(495)1351011; E-mail: vadim_grebenev@mail.ru

СТРУКТУРА Fe-Ni-Al СПЛАВОВ В ВЫСОКОКОЭРЦИТИВНОМ СОСТОЯНИИ

О.В. Гришина¹⁾, В.П. Менушенков²⁾, А.П. Менушенков¹⁾, В.В. Сидоров¹⁾,
Т.А. Свиридова²⁾, Р.В. Черников^{1),3)}.

- ¹⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*
- ²⁾ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва*
- ³⁾ *HASYLAB at DESY, Hamburg, Germany*

Магнитотвердые Fe-Ni-Al сплавы принадлежат к группе сплавов с областью нерастворимости на диаграмме состояния. Ниже границы этой области твердый раствор распадается на две изоморфные кубические фазы. Высокая коэрцитивная сила H_c достигается на промежуточной стадии распада и связана с неравновесной структурой, формирующейся при отпуске закаленного твердого раствора (обработка I), или при охлаждении однородного твердого раствора с критической скоростью (обработка II) [1]. При второй обработке H_c достигает значений в 1.5 раза больших, чем при обработке I. Данные о характере структурных превращений в сплавах Fe-Ni-Al, приводящих к формированию высококоэрцитивного состояния, в частности, изменения состава и структуры фаз при распаде твердого раствора, противоречивы и требуют уточнения. В связи с этим были проведены исследования локальной кристаллической структуры сплава $Fe_{51.1}Ni_{23.5}Al_{23.7}Si_{1.7}$ методом EXAFS-спектроскопии с использованием синхротронного излучения при температурах 77 К и 300 К после различных термических обработок.

Установлено, что в процессе охлаждения твердого раствора с критической скоростью наблюдается перестройка локального окружения никеля относительно быстро закаленного образца вследствие расслоения твердого раствора. Последующий отжиг при 780°C практически восстанавливает локальную структуру, характерную для быстро закаленного образца, в результате коэрцитивная сила уменьшается. Работа частично поддержана РФФИ (грант № 11-02-01174-а), и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (ГК № 16.740.11.0139).

Гришина Ольга Викторовна
115409, Москва, Каширское шоссе, д.31
Тел.: (495)3239386; Факс: (495)3242111; E-mail: olgagrish@gmail.com

ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА ФЛЮОРИТОВОЙ ФАЗЫ $\text{Ca}_{0.93}\text{Y}_{0.07}\text{F}_{2.07}$

Н.А. Губаль^{1,2)}, Е.А. Сульянова¹⁾, Д.Н. Каримов¹⁾, И.А. Верин¹⁾, Б.П. Соболев¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва*

Нестехиометрические флюоритовые фазы $M_{1-x}R_xF_{2+x}$ ($M = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{Cd}, \text{Pb}$; $R =$ редкоземельные элементы) содержат структурные дефекты (анионные вакансии V_F , междоузельные ионы фтора F_{int} и R^{3+}), сгруппированные в кластеры.

Дефектная структура $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{F}_{2+x}$ изучалась [1 - 3]. В [1] F_{int} найден в одной позиции $48i$ ($x, x, 0.5$). В [2] изучена серия $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{F}_{2+x}$ с $x = 0.06, 0.1, 0.15, 0.25, 0.32$. В [2] F_{int} , образующие ядро кластеров, найдены в двух позициях: $48i$ ($x, x, 0.5$) и $32f$ (x, x, x). Координата фтора в $32f$ в $\text{Ca}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{F}_{2.25}$ не позволяет отнести его ни к «релаксированному», ни к «ядерному». В [3] F_{int} присутствует только в позиции $48i$, а появление фтора в «релаксированной» позиции $32f$ происходит при нагреве до 773К. Причины разногласий не ясны.

В настоящей работе методом рентгеноструктурного анализа изучено строение неупорядоченной фазы $\text{Ca}_{0.93}\text{Y}_{0.07}\text{F}_{2.07}$, (тип CaF_2 , пр. гр. $Fm\bar{3}m$, $a = 5,4766(5)$ Å). В анионном мотиве найдены V_F и F_{int} в позиции $48i$, аналогичные наблюдавшимся [1, 3]. Впервые для $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{F}_{2+x}$ установлено смещение части катионов вдоль оси 4 и ангармонизм тепловых колебаний основных ионов фтора.

Описание строения твердого раствора $\text{Ca}_{0.93}\text{Y}_{0.07}\text{F}_{2.07}$ базируется на октаэдрической конфигурации кластера дефектов $\{\text{Ca}_{14-n}\text{Y}_n\text{F}_{64+n}\}$. Использование структурных данных упорядоченной фазы $\text{Ca}_{14}\text{Y}_5\text{F}_{43}$ [4] позволило идентифицировать деформации кристаллической решетки неупорядоченной (нестехиометрической) фазы $\text{Ca}_{0.93}\text{Y}_{0.07}\text{F}_{2.07}$.

1) *Отрощенко Л.П., Александров В.Б., Быданов Н.Н. и др. // Кристаллография. 1988. Т.33. С.764.*

2) *Cheetham A.K.; Fender V.E.F.; Cooper M.J. // J. Phys. C. 1971. № 4, P. 3107.*

3) *Hoffmann M., Hull S., et al. // J.Phys.: Condens. Matt. 1997. V. 9. P. 845.*

4) *Bevan D.J.M., Strahle J., Greis O. // J. Solid State Chem. 1982. V. 44, № 1, P. 75.*

МЕЗОСТРУКТУРА И ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КСЕРОГЕЛЕЙ ГИДРАТИРОВАННОГО ZrO_2 , ПОЛУЧЕННЫХ ГИДРОЛИЗОМ $Zr(OC_3H_7)_4$

Н.Н.Губанова¹⁾, В.К.Иванов²⁾, Г.П.Копица¹⁾, А.Е.Баранчиков²⁾,
Е.В.Яковенко³⁾, С.В.Григорьев¹⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

²⁾ *Институт общей и неорганической химии, Москва*

³⁾ *РНИЦ Курчатовский институт, Москва*

Нанокристаллический диоксид циркония находит широкое применение в промышленности благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. В частности, диоксид циркония является ключевым компонентом сорбентов, сенсоров, катализаторов и носителей для катализаторов, твердых электролитов в твердотельных оксидных топливных элементах и др. Большинство современных методов синтеза диоксида циркония основано на гидролизе цирконий-содержащих соединений и последующей обработке гидратированного диоксида циркония в строго контролируемых условиях. При этом микроморфология и свойства получаемых материалов в существенной степени зависят от условий проведения гидролиза.

В настоящей работе методами малоуглового рассеяния нейтронов и малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, а также низкотемпературной адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии исследованы мезоструктура и фрактальные свойства аморфных ксерогелей $ZrO_2 \cdot xH_2O$, синтезированных в результате гидролиза $Zr(OC_3H_7)_4$ в водных растворах при различных значениях pH среды и под влиянием ультразвуковой (УЗ) обработки. МУРН и МУРР измерения двух серий образцов ксерогелей $ZrO_2 \cdot xH_2O$, синтезированных при pH = 2.7, 5.5, 6.3, 11.3, 13.5, и под воздействием УЗ обработки, были проведены в диапазоне переданных импульсов $0.5 \cdot 10^{-3} < q < 0.25 \text{ \AA}^{-1}$.

Анализ полученных данных позволил установить существенное влияние pH среды и УЗ обработки на мезоструктуру ксерогелей, их фрактальную размерность, а также на размер агрегатов и образующих их мономерных частиц.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Образования Российской Федерации (проект 14.740.11.0281).

Губанова Надежда Николаевна
188300, Гатчина, Орлова роща, Петербургский институт ядерной физики РАН
Тел.: (81371)46121; Факс: (81371)39023; E-mail: gubnn@ins.npni.spb.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ГИДРАТАЦИИ ЦЕМЕНТА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

А.М.Гурьянов¹⁾, В.Т.Лебедев²⁾, В.М.Лебедев²⁾

¹⁾ Самарский государственный архитектурно-строительный университет, Самара

²⁾ Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Гидратация цемента приводит к превращению безводных клинкерных минералов в соответствующие кристаллогидраты. Свойства формируемого цементного камня определяются структурой образующихся наночастиц гидросиликата кальция, их поверхностной активностью (удельной поверхностью).

На дифрактометре «Мембрана-2», установленном на реакторе ВВР-М ПИЯФ, методом малоуглового рассеяния нейтронов исследовалась динамика изменений в зависимости от времени (до 28 суток) структуры образцов гидратированного цемента. Длина волны нейтронов $\lambda = 0,3$ нм при ширине линии $\Delta\lambda/\lambda = 0,3$. Диапазон передаваемых нейтронных импульсов $q = (4\pi/\lambda)\sin(\theta/2)$ от $0,03$ нм⁻¹ до $0,8$ нм⁻¹. Рассеянные на образцах нейтроны регистрировались 41-канальным детектором в интервале углов $-2^\circ \leq \theta \leq +2^\circ$.

Сечения рассеяния $\sigma(q)$, как функции переданного нейтронного импульса q , получались из экспериментальных спектров с учетом фона и трансмиссии при нормировке данных на интенсивности рассеяния для стандартного образца известного сечения (1 мм Н₂О). С помощью Фурье-преобразования (пакет ATSAS) из полученных экспериментальных данных для сечений рассеяния нейтронов восстанавливались распределения рассеивающих объектов по корреляционным радиусам в приближении однородных сфер.

Полученные зависимости интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов от переданного нейтронного импульса в двойных логарифмических координатах указывают на наличие фрактальных свойств у рассеивающих структур и позволяют проследить за динамикой их изменений в процессе гидратации.

Гурьянов Александр Михайлович, к.ф.-м.н., доцент
443001, Самара, ул. Молодогвардейская, 194, СГАСУ
Тел.: (846)2420969; Факс: (846)3321965; E-mail: gurjanov@sgasu.smr.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФЕНИЛСИЛАНОВ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Т.Н. Даниленко, В.Г. Власенко, М.М. Татевосян

НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

Проведено исследование электронного строения ряда фенилсиланов $\text{Ph}_4\text{-}_n\text{SiH}_n$ ($n=0-3$) методами рентгеновской эмиссионной спектроскопии. Получены рентгеновские флуоресцентные $\text{SiK}\beta_1$ -спектры, которые образуются в результате электронных переходов с валентных 3p уровней кремния на вакансию в Si 1s-уровне. Совокупность компонентов $\text{SiK}\beta_1$ -спектра отображает энергетическую структуру МО, содержащих вклады 3p АО кремния, причем интенсивности этих компонентов пропорциональны квадратам коэффициентов соответствующих АО в МО соединения. Таким образом, представляется возможным определить степень участия атомов кремния в химических взаимодействиях с атомами окружения или лигандами, координированными на атом кремния, и установить закономерности формирования электронной структуры кремнийорганических соединений.

Показано, что энергетическая структура экспериментальных $\text{SiK}\beta_1$ -спектров Ph_4Si и Ph_3SiH по существу определяется бензольной системой энергетических уровней, слабо возмущенных взаимодействием с валентными АО кремния. Для соединения PhSiH_3 структура $\text{SiK}\beta_1$ -спектра упрощается и в экспериментальном спектре проявляются, в основном, t_2 уровень (главный максимум $\text{SiK}\beta_1$ -спектра) и a_1 уровень (длинноволновый малоинтенсивный компонент) тетраэдрического SiH_4 .

Методом функционала плотности рассчитано электронное строение фенилсиланов $\text{Ph}_{4-n}\text{SiH}_n$ ($n=0-4$). В наших квантовохимических расчетах использовался гибридный B3LYP функционал и 6-311G** базис. Расчеты проводились с использованием программы Gaussian03. На основе проведенных расчетов построены теоретические рентгеновские эмиссионные $\text{SiK}\beta_1$ -спектры исследованных соединений. Энергетическая структура и форма теоретических спектров находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Даниленко Татьяна Николаевна, младший научный сотрудник
344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, д.194
Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: tdanil1982@yandex.ru

ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ И ЗАРЯДОВОЕ СОСТОЯНИЕ АТОМОВ ГАЛЛИЯ И ЭРБИЯ В ЛЕГИРОВАННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ CdSe

С.Г. Дорофеев¹⁾, А.И. Лебедев¹⁾, И.А. Случинская¹⁾, А. Ерко²⁾, П.А. Котин¹⁾,
А.Н. Золотых¹⁾

¹⁾ *Московский государственный университет, Москва*

²⁾ *BESSY GmbH, Berlin*

Легирование квантовых точек (КТ) примесями позволяет управлять спектрами и кинетикой их люминесценции. Целью настоящей работы являлось установление структурного положения и зарядового состояния атомов галлия и эрбия в золях КТ CdSe методами XAFS-спектроскопии.

Образцы синтезировали взаимодействием триоктилфосфинселенида с олеатами Cd, Ga или Er при 230°C. КТ очищали от прекурсоров и побочных продуктов трехкратным повторением коагуляции золя, отделения осадка и растворения в гексане. КТ с Er имели форму тетраподов, а с Ga – сферическую. Примесь Er, в отличие от Ga, приводила к существенным изменениям спектров люминесценции: разгоранию второй ИК-полосы ($\lambda_{\max} = 1.1$ мкм), ослаблению экситонного пика и скачкообразному изменению стоковского сдвига [1].

Спектры XANES и EXAFS записывались на *K*-краях Ga и Er в BESSY на станции KMC-2 при 300 К на концентрированных золях КТ.

Анализ данных XANES показал, что примесные атомы Ga и Er в КТ находятся в зарядовом состоянии +3. По данным EXAFS ионы Ga^{3+} и Er^{3+} полностью окружены атомами кислорода, расположенными на расстоянии $R_{\text{Ga-O}} = 1.94$ Å (координационное число = 5–6) и $R_{\text{Er-O}} = 2.37$ Å (к.ч. = 7–8), вторая координационная сфера находится на расстоянии $R_{\text{Ga-Ga}} = 3.05$ Å и $R_{\text{Er-Cd}} = 3.50$ Å.

По нашему мнению, примесные атомы Er располагаются на поверхности квантовых точек, окруженные атомами кислорода, а Ga образует связанные с квантовыми точками преципитаты.

1. С.Г. Дорофеев, А.Н. Золотых, Г.И. Целиков, Сб. матер. Всероссийской конференции по наноматериалам «Нано-2011» (Москва, ИМЕТ РАН, 2011), с. 58.

Дорофеев Сергей Геннадиевич, с.н.с.
119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, химический факультет
Тел.: 8(495)9393871; Факс: 8(495)9390998; E-mail: dorofeev@inorg.chem.msu.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ СПИНОВОЙ КИРАЛЬНОСТИ РАЦЕМАТНОГО КРИСТАЛЛА
Fe_{0.65}Co_{0.35}Si В А-ФАЗЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ
НЕЙТРОНОВ**

В.А. Дядькин¹⁾, С.В. Григорьев¹⁾, Е.В. Москвин¹⁾, Д. Менцель²⁾, Х. Эккерлебе³⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики, Гатчина*

²⁾ *Технический университет Брауншвейга, Германия*

³⁾ *Гельмгольц-центр Гестахт, Германия*

Хорошо известно, что родственные силициду марганца MnSi соединения (твёрдые растворы FeSi с MnSi и CoSi) упорядочиваются в геликоидальную спиновую структуру с малым волновым вектором \mathbf{k} . Одним из тонких эффектов, наблюдаемых в этих соединениях, является наличие внутри упорядоченной фазы, в узком интервале магнитных полей и температур, А-фазы (к-флоп перехода). В малоугловом рассеянии эта фаза выглядит как скачкообразный переход Брэгговского пика, соответствующего спиновой спирали, из параллельного $\mathbf{H} \parallel \mathbf{k}$ в перпендикулярное $\mathbf{H} \perp \mathbf{k}$ внешнему магнитному полю положение. Однако пики $\mathbf{H} \parallel \mathbf{k}$ не исчезают целиком, оставляя до 5% интенсивности. В данной работе исследуется киральность остаточного брэгговского пика в А-фазе рацематного монокристаллического образца Fe_{0.65}Co_{0.35}Si. Кристаллографическая структура такого образца состоит из двух инверсионных двойников (30% левый и 70% правый, с соответствующей структурной киральностью 0.4), однако главные кубические оси этих инверсионных доменов сонаправлены, критическая температура этих двойников также одинакова $T_C = 50$ К. Вне А-фазы киральное отношение спиновых спиралей неизменно и равно 0.4, однако внутри А-фазы при температуре $T=49$ К, киральное отношение меняется на противоположное -0.4, что свидетельствует о перевороте спиновой киральности. Данный эффект может свидетельствовать о том, что левые спирали более стабильны в А-фазе, чем правые.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-02-282-а) и программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009 - 2013 годы" (госконтракт № 02.740.11.0874).

Дядькин Вадим Александрович

188300, Ленинградская обл., Гатчина, Орлова роща

Тел.: (81371)46185; Факс: (81371)39023; E-mail: dyadkin@lns.pnpi.spb.ru

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СОЕДИНЕНИЙ РЯДА Cu_3SnS_4 - $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$

Т.Л.Евстигнеева¹⁾, Н.В.Трубкин¹⁾, Ю.К.Кабалов²⁾

¹⁾ ИГЕМ РАН, Москва

²⁾ Московский государственный университет, Москва

С помощью рентгеновского и микрорентгеноспектрального анализов, мессбауэровской спектроскопии (МС) и др. проведено изучение особенностей изоморфизма в соединениях ряда курамит – станнин, $\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$ ($0 < x < 1$). Установлено, что в $\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$ с $0 < x < \sim 0.5$ железо входит в виде Fe^{3+} , а в соединениях второй половины ряда ($0.5 < x < 1$) появляется Fe^{2+} и его количество растёт до 1 ф.ед. в $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$ с одновременным уменьшением Fe^{3+} до 0. Согласно результатам МС ионы Fe^{2+} занимают тетраэдры из атомов серы. Поскольку значения δ для парциальных спектров Fe^{3+} больше, чем характерные для Fe^{3+} в тетраэдрах, и типичны для октаэдрического окружения, ранее нами было предположено, что ионы Fe^{3+} занимают серные октаэдры общей позиции 8g. Изучение структуры нескольких соединений ряда подтвердило эти заключения, однако результаты EXAFS свидетельствуют, что в структуре соединений $\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$ атомы железа занимают тетраэдры из атомов серы. Возможным объяснением завышенного значения δ может быть электронный перенос с атомов Cu на атом Fe при взаимодействии $\text{Cu}^{1+} - \text{Fe}^{3+}$ или наличие смешанной валентности атомов Fe. Для проверки и уточнения схемы изоморфизма в $\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$ использован метод ПЭМ (JEM 100C и JEM-2100). На первый взгляд структуры промежуточных членов ряда тетрагональные (пр.гр. $I \bar{4}2m$, $a = b \sim 5.45$ и $c \sim 10.85 \text{ \AA}$), производные от гцк структуры типа сфалерита с $a = 5.45 \text{ \AA}$. Однако наклоны кристаллов вокруг ряда точечных отражений выявили сечения обратной решетки с дополнительными рядами слабых рефлексов, свидетельствующими об удвоении параметра вдоль оси c крист. решетки станнина и пр.гр. $I4_122$. Монокристаллы часто имеют взаимоориентированное наноблочное строение с размером блоков $\sim 60 \text{ \AA}$. Необходимы дополнительные исследования,

Евстигнеева Татьяна Львовна,

119017, Москва, Старомонетный пер., д. 35,

Тел.: 8(499)2308269, Факс: 8(495)9511587, E-mail: evst@igem.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА В СИСТЕМЕ Al-Cu-Fe НА ОСНОВЕ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

М.А.Евсюкова¹⁾, А.А.Теплов²⁾, М.Н.Михеева²⁾, А.П.Менушенков³⁾, А.В.Солдатов¹⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ Российский Научный центр «Курчатовский институт», Москва

³⁾ Московский инженерно-физический институт, Москва

Квазикристаллические структуры – это новый класс аperiodических структур, которые в отличие от традиционных кристаллических структур характеризуются отсутствием трансляционной симметрии. Квазикристалл, особый тип упаковки атомов в твердом веществе, часто характеризующийся икосаэдрической симметрией, дальним ориентационным порядком и отсутствием трансляционной симметрии, присущей обычному кристаллическому состоянию. В связи с этим, исследование локальной атомной и электронной структуры рассматриваемых в представленной работе квазикристаллических сплавов Al-Cu-Fe, является своевременной и актуальной задачей физики конденсированного состояния.

На основе анализа ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (XANES) и проведения компьютерного моделирования была сделана попытка определения особенности локальной атомной и электронной структуры кристаллов префазы Al_7Cu_2Fe , $Al_{65}Cu_{22}Fe_{13}$ и квазикристалла $Al_{65}Cu_{22}Fe_{13}$.

Спектры рентгеновского поглощения за K-краями меди и железа исследуемых образцов системы Al-Cu-Fe были измерены на лабораторном спектрометре «R-XAS Looper».

Вычисление спектров поглощения было выполнено с помощью программных комплексов FEFF9 (самосогласованный метод полного многократного рассеяния в маффин-тин приближении) и FDMNES2009 (метод конечных разностей в полном потенциале). Структурные параметры локального окружения уточнялись с использованием подхода многомерной интерполяции спектров, реализованного в программном комплексе FitIt.

Проведен расчет полных и парциальных плотностей электронных состояний для модели квазикристалла.

Евсюкова Марина Анатольевна
344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге 5, Южный Федеральный Университет, физический факультет
Тел.: (863)2975326; факс: (863)2901003; E-mail: marina-evsukova@mail.ru

РЕШЕНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСА N-ОКСИДА ХИНОЛИНА С CuCl_2 СОСТАВА (2:1) ПО ПОРОШКОВЫМ ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ

Т.А.Екимова, Л.А.Алешина, А.В.Захаров

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

Большой интерес к молекулярным комплексам гетероароматических N-оксидов объясняется их высокой биологической активностью, однако атомно-молекулярная структура этих соединений изучена мало. Целью данной работы было определение кристаллической и атомно-молекулярной структуры молекулярного комплекса N-оксида хинолина с CuCl_2 состава (2:1). Исследуемое соединение было синтезировано в виде порошка на кафедре молекулярной биологии, биологической и органической химии Петрозаводского государственного университета. Рентгенограмма образца была получена в медном K_α -излучении в геометрии на отражение. Индексирование порошковой рентгенограммы проводилось по 29 сильнейшим линиям. Было найдено решение в триклинной сингонии с периодами элементарной ячейки: $a=10.313(3)\text{\AA}$, $b=9.274(3)\text{\AA}$, $c=10.434(5)\text{\AA}$, $\alpha=69.41(4)^\circ$, $\beta=106.50(4)^\circ$, $\gamma=110.38(3)^\circ$, $V=860.8\text{\AA}^3$, число молекул на элементарную ячейку $Z=2$, пространственная группа симметрии P-1. Факторы достоверности, по которым оценивалась надежность индексирования, составили: $M_{20}=11.5$, $F_N=29.6$. Положение молекулы в элементарной ячейке было найдено методом симулированного отжига. Полученные на этапе поиска положения молекулы координаты атомов уточнялись затем методом Ритвелда. Факторы недостоверности составили: $R_p=12.90\%$, $R_{wp}=13.35\%$. Анализ найденной структуры показал, что все значения длин связей и расстояния между атомами лежат в области кристаллохимически достоверных значений. В кристаллической решетке молекулы образуют параллельные цепочки вдоль осей b и c. Между собой в цепочках молекулы связаны слабыми водородными связями. Таким образом, на основе анализа порошковой дифракционной картины решена структура молекулярного комплекса N-оксида хинолина с CuCl_2 состава (2:1).

Екимова Татьяна Анатольевна, ст. преподаватель
185910, Петрозаводск, пр. Ленина, д. 33
Тел.: (814-2)719671; Факс: (814-2)711000; E-mail: dery77@mail.ru

РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В СПЛАВАХ ФАЙНМЕТ

Н.В.Ершов¹⁾, В.И.Федоров²⁾, В.А.Лукшина¹⁾, Ю.П.Черненко²⁾, А.П.Потапов¹⁾

¹⁾ *Институт физики металлов, УрО РАН, Екатеринбург*

²⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

Методом рентгеновской дифракции исследовалась атомная структура нанокристаллов в магнитомягких сплавах FeCuNbSiB (файнмет), полученных в результате нанокристаллизующего отжига и охлаждения под действием растягивающей нагрузки. Показано, что брэгговские пики от ОЦК решетки в дифрактограммах, измеренных при сканировании вдоль направления приложения нагрузки, сдвинуты в направлении меньших углов рассеяния. В поперечно измеренных дифрактограммах пики сдвинуты в направлении больших углов рассеяния. Следовательно, ОЦК решетка нанокристаллов деформирована: в продольном направлении межплоскостные расстояния больше, а в поперечном – меньше, чем в недеформированном состоянии. При этом разные межплоскостные расстояния искажаются не одинаково: вдоль направлений типа $\langle 100 \rangle$ растяжения и сжатия решетки максимальны и достигают 1 %, в направлениях $\langle 111 \rangle$ - минимальные, не превосходят экспериментальной погрешности. Относительные изменения межплоскостных расстояний (hkl) – $\Delta d/d$ зависят от угла Φ между направлением $[hkl]$ и ближайшей осью $\langle 111 \rangle$, чем больше угол Φ , тем больше $\Delta d/d$.

В сплавах $\text{Fe}_{87-X}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_X\text{B}_9$ с разными X в интервале от 0 до 13.5 характер остаточных деформаций решетки нанокристаллов не меняется. При $X < 9.5$ в результате нанокристаллизации под нагрузкой в них наводится продольная, а при $X \geq 9.5$ – поперечная магнитная анизотропия. Формирование состояния с тем или иным типом магнитной анизотропии после отжига и охлаждения под растягивающей нагрузкой связано с остаточными упругими напряжениями в нанокристаллах сплава. Изменение типа магнитной анизотропии объясняется изменением знака магнитоупругого взаимодействия в нанокристаллах с положительного на отрицательный при росте X и увеличении объемной доли фазы Fe_3Si , которая характеризуется отрицательной магнитострикцией.

Ершов Николай Владимирович

620990, Екатеринбург, ул.С.Ковалевской, д.18

Тел.: (343)3783794; Факс: (343)3745244; E-mail: nershov@imp.uran.ru

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ЛЕДЯНЫХ НАНОКЛАСТЕРАХ

В.Б.Ефимов, А.Н.Изотов, Л.П.Межов-Деглин, С.С.Хасанов
Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

Один из способов получения наночастиц из веществ, находящихся при нормальных условиях в виде газа или жидкости, состоит в резком охлаждении потока газообразного гелия с примесью паров исследуемого вещества до температур сверхтекучего гелия He-II $T < 2$ К. При этом на поверхности He-II образуется высокопористый примесь-гелиевый конденсат, или примесный гель (*soft-matter*), каркас которого составляют примесные кластеры, поры между которыми заполняет сверхтекучий гелий. При отогреве геля выше 4.2 К образец распадается и на дне рабочей ячейки образуется мелкодисперсный порошок примеси.

В данной работе приведены результаты изучения структуры ледяного порошка, образующегося при распаде водяного геля. Водяной гель получали при конденсации потока газообразного ^4He с примесью паров H_2O (~ 2%) на поверхности He-II в рабочей ячейке при температурах ~ 1.6 К. Скорость течения потока газа в широкой трубе набора ~ 5 см/с, длина трубки порядка 50 см, объем образца геля в He-II достигал ~10 – 15 см³. Для приготовления ледяного порошка образец отогревали до температуры в 4.2. К в объеме жидкого гелия при давлении насыщенных паров. От 4.2 К и до азотных температур отогрев происходил в атмосфере гелиевых паров при давлении в 1 атм. Далее ячейку с ледяным порошком извлекали из гелиевого криостата, и часть ледяного порошка объемом в несколько мм³ размещали на рабочей площадке азотного криостата дифрактометра Siemens D500. Рентгеновские измерения, которые проводили в интервале температур от 85К до комнатных при ступенчатом повышении температуры с шагом в 10 К, показали, что исходный образец состоит в основном из кристаллитов воды кубической фазы размерами порядка 5-7 нм с внедрением аморфной фазы. Отогрев выше 100 К приводил к повышению размеров кристаллитов и превращению их в кристаллы гексагональной фазы.

Ефимов Виктор Борисович, с.н.с
142432, Московская обл., Черноголовка, ИФТТ РАН
Тел.: 8(496)5223704; Факс: 8(496)5228160; E-mail: victor_efimov@yahoo.co.uk

ОСОБЕННОСТИ ИДЕНТИФИКАЦИИ СМЕШАНОСЛОЙНЫХ tv/cv ИЛЛИТОВ ПО ЭЛЕКТРОНОГРАММАМ ОТ ТЕКСТУР

А.П. Жухлистов

*Институт геологии рудных месторождений, петрографии,
минералогии и геохимии (ИГЕМ) РАН, Москва*

Для тонкодисперсных Al-диоктаэдрических 2:1 слюдистых минералов существуют структурные разновидности, построенные из слоев с различным распределением двух октаэдрических катионов по трем возможным октаэдрическим позициям, когда вакантным является либо *транс*-октаэдр (tv -слои с идеальной симметрией $C2/m$), либо один из двух симметрически независимых *цис*-октаэдров (cv -слои с идеальной симметрией $C2$). Кроме образования самостоятельных мономинеральных фаз tv - и cv -слои могут переслаиваться в частицах иллита с формированием смешанослойных структур $tv/cv1M$. При этом позиции hkl рефлексов в дифракционной картине $tv/cv1M$ при статистическом распределении tv - и cv -слоев, как и в случае периодических структур $tv1M$ и $cv1M$, отвечают единой элементарной ячейке. По электронограммам от текстур установлены смешанослойные tv/cv иллиты, для которых положение рефлексов 11/ в электронограммах от текстур не соответствует единой элементарной ячейке. Расчетное моделирование профилей рефлексов 02/, 11/ вдоль первого эллипса проведено для $tv/cv1M$ иллитов, состоящих из 10 слоев, с использованием статистической модели Маркова в квазигомогенном приближении. Показано, что такие tv/cv иллиты можно рассматривать как физическую смесь двух смешанослойных $tv/cv1M$ фаз, различающихся содержанием неупорядоченно переслаивающихся tv - и cv -слоев, либо как однофазные tv/cv образования, в котором tv - и cv -слои распределены с некоторой тенденцией к сегрегации. Дифракционные особенности (позиции рефлексов и распределение интенсивностей) для данных моделей в значительной мере подобны при равенстве среднего содержания tv - и cv -слоев. Рассмотрены структурные факторы, указывающие на предпочтительность использования двухфазной модели.

Жухлистов Анатолий Павлович
119017, Москва, Старомонетный пер., 35
Тел.: (499)2308210; Факс: (495)9511587; E-mail: anzhu@gem.ru

МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ ХАРАКТЕРА ИЗМЕНЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УРАН-ПЛУТОНИЕВОВОГО ОКСИДНОГО ТОПЛИВА

Н.А. Иванова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)

Перспективным направлением в развитии атомной энергетики является использование смешанного уран-плутониевого оксидного топлива. Его термодинамические характеристики имеют важное значение для прогнозирования поведения в реакторах при высоких выгораниях и особенно кислородный потенциал, от величины которого зависят химическое состояние продуктов деления, степень окисления внутренней поверхности оболочки твэла при выгорании топлива, его технологические и эксплуатационные свойства. Однако, для изучения характера изменения термодинамических свойств таблеток смешанного уран-плутониевого оксидного топлива $U_{1-y}Pu_yO_{2\pm x}$ в зависимости от нестехиометрии x , содержания Pu и температуры целесообразно вначале проводить измерения на уран-цериевых оксидах $U_{1-y}Ce_yO_{2\pm x}$. Это объясняется тем, что церий является химическим аналогом плутония и в то же время не относится к радиоактивным и токсичным материалам, что облегчает проведение экспериментов и их безопасность.

Таблетки UO_2 , содержащие 20 мас. % CeO_2 (близкая концентрация плутония характерна для топлива быстрых реакторов) были приготовлены методами порошковой металлургии. Керамографическим и рентгеновским фазовым анализами изучены фазовый состав и структура легированного оксидного топлива.

Методами электродвижущей силы твердоэлектролитной гальванической ячейки и твердофазного кулонометрического титрования установлены закономерности изменения кислородного потенциала в зависимости от температуры и величины нестехиометрии для оксида $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{2\pm x}$.

Иванова Наталья Анатольевна, доцент
115563, Москва, ул. Шипиловская, д.23
Тел.: (495)3944505; E-mail: uran-o2@yandex.ru

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ АЛМАЗСОДЕРЖАЩЕЙ ШИХТЫ И НАНОАЛМАЗОВ ДЕТОНАЦИОННОГО СИНТЕЗА

С.Н.Ивашевская

*Учреждение Российской академии наук Институт геологии
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

Основной целью очистки алмазсодержащей шихты (АШ) и наноалмазов (НА) является удаление неалмазных форм углерода. Практически все известные методы основаны на использовании различной устойчивости алмазных и неалмазных форм углерода к действию окислителей. В данной работе было исследовано влияние термической обработки (ТО) на процесс очистки.

Образцы НА были получены из двух источников: Gansu Liru Lingyun NanoMaterial Co Ltd. (Китай) и NanoCarbon Research Institute Ltd. (Япония). Образец АШ (марка АШ–А) был получен из НП ЗАО “СИНТА” (Беларусь). Истинную информацию о свойствах углеродных наноструктур дает возможность получить только комплекс диагностических методов. Химический состав был определен методом масс-спектрометрии (масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой ICP-MS Xseries2 (ThermoFisher Scientific)) и рентгеноспектрального анализа (VEGA II LSH электронный микроскоп (TESCAN ОАО) с приставкой для микрозондового анализа); различные уровни агрегации структурных элементов были проанализированы с помощью методов СЭМ (VEGA II LSH) и АСМ (N'Tegra Aura NT-MDT); анализ структурных параметров кристаллитов был проведен с помощью рентгеноструктурного анализа (Thermo Scientific ARL X'TRA Powder X-ray Diffraction System).

Наши исследования показали, что ТО в мягких условиях является перспективным подходом с точки зрения экономики, безопасности и охраны окружающей среды, для избавления от аморфного углерода в НА и АШ.

Работа поддержана ОНЗ РАН-5, ФА РФ по науке и инновациям ГК (№ 02.740.11.0395, № 02.740.11.5179), ФА по образованию, ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 - 2013 год” ГК (П1156,П1220)

Ивашевская Светлана Николаевна
185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, д.11
Тел.: (8142)782753; Факс: (8142)780602; E-mail: ivashevskaja@yahoo.com

НЕЙТРОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛА $Y_{0.715}Ca_{0.285}F_{2.715}$

А.И.Калюканов¹⁾, Н.Б.Болотина¹⁾, Л.Е.Фыкин²⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова»

²⁾ Филиал «НИФХИ им. Л.Я.Карпова», г. Обнинск

Деление ряда на группы с родственными свойствами не всегда объясняются только немонотонным изменением ионных радиусов. Среди соединений редкоземельных элементов трифториды RF_3 отличаются простотой состава и чувствительностью свойств к тонким изменениям структуры. Причины тонкого деления РЗЭ и их соединений по свойствам пока не ясны и требуют систематизация знаний о структурных особенностях трифторидов.

Многие RF_3 ($R = Y, La - Eu$) кристаллизуются по типу тисонита LaF_3 , симметрия которого обсуждается до сих пор. Выбор делается между более упорядоченной формой с пр. гр. $P\bar{3}c1$ и “большой” ячейкой ($z = 6$) и разупорядоченной формой с пр. гр. $P6_3/mmc$ и “малой” ячейкой ($z = 2$).

Гетеровалентные замещения R^{3+} на M^{2+} сопровождаются образованием анионных вакансий, влияние которых на степень упорядоченности тисонитовой структуры ранее изучалось на примере $Gd_{0.8}Ca_{0.2}F_{2.8}$ [1] и $La_{0.85}Sr_{0.15}F_{2.85}$ [2].

Для исследования были выбраны монокристаллы $Y_{0.715}Ca_{0.285}F_{2.715}$. Нейтронографическое исследование проводилось на реакторе ВВР-ц (филиал НИФХИ им. Л.Я.Карпова), $\lambda = 1.167 \text{ \AA}$, Си - монохроматор, $\theta/2\theta$ - сканирование. Рассмотрены две модели структуры в пр. гр. $P6_3/mmc$, $z = 2$ и пр. гр. $P\bar{3}c1$, $z = 6$.

Авторы благодарят Соболева Б.П., предоставившего монокристалл для исследования.

1. Отрощенко Л.П., Александров Б.П., Максимов Б.А., Симонов В.И., Соболев Б.П. // Кристаллография. 1985. Т. 30. С. 658.
2. Дудка А.П., Лошманов А.А., Соболев Б.П. // Кристаллография. 1998. Т. 43. С. 605.

Калюканов Андрей Игоревич
248030, Калуга, ул. Огарева, д. 3, кв. 5
Тел.: 8(915)8963301; E-mail: iate_kot@mail.ru

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА 6-ГИДРАТ-MGCL₂-НИКОТИНОВОЙ КИСЛОТЫ

З. Каримов, З.Ф. Бекнозарова, И.М. Иминова

Ташкентский институт ирригации и мелиорации

С целью объективного определения пространственного строения 6-гидрат-MgCl₂ никотиновой кислоты нами были проведены рентгеноструктурный анализ. Параметры элементарной ячейки и интенсивности отражений определяли на четырех круглом дифрактометре STOE Stadi-4. $a=7.1840(14)\text{Å}$, $b=8.3900(17)\text{Å}$, $c=10.551(2)\text{Å}$, $\alpha=94.93(3)^\circ$, $\beta=104.40(3)^\circ$, $\gamma=106.71(3)^\circ$; $V=581.4(3)\text{Å}^3$, $\rho=1.450\text{ г/см}^3$. В молекуле 6-гидрат-MgCl₂ никотиновой кислоты (рис.1.) атом магния расположена в частной позиции и координирован шестью молекулами воды в форме октаэдра. Величины координационных связей и валентных углов такие же, как в структуре Mg(2-ПМК)₂·Cl₂·4H₂O[1], хотя в структуре Mg(2-ПМК)₂·Cl₂·4H₂O окружения атома магния является искаженная октаэдр и разброс координационных связей составляет 0,07-0,1 Å.

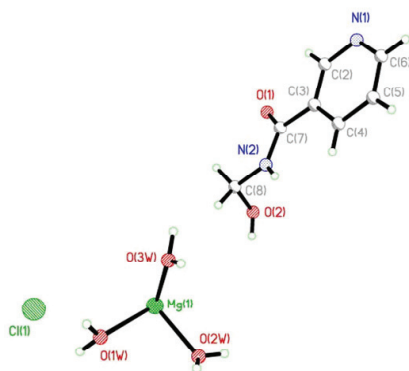


Рис.1. Молекула 6-гидрат-MgCl₂ никотиновой кислоты

Никотиновой кислота связано с фрагментом 6-гидрат-Магния водородными связями: H₂O(2)---O(2) - 2,72 Å, H₂O(3)---O(1) - 2,77 Å и H₂O(3)---N(1) - 2,78 Å, а также через атома хлора. Двугранный угол между пиридиновым кольцом и карбоксильной группой равен 9,3°. Атом магния координируясь молекулами воды образует октаэдр, а никотиновая кислота связана с атомом магния водородной связью через кислородными атомами молекулы воды.

**ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ $RE_2O_3-MeO_2$
($RE=DY,GD$, $ME=HF,ZR$): БАЙЕСОВ АНАЛИЗ**

О.В.Кашурникова¹⁾, А.П.Менушенков¹⁾, В.Ф.Петрунин¹⁾, В.В.Попов¹⁾,

А.А.Ярославцев¹⁾, Р.В.Черников²⁾, Я.В.Зубавичус³⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

²⁾ *ALBA-CELLS, 08193 Bellaterra, Barcelona, Spain*

³⁾ *КЦСИ, РНЦ «Курчатовский институт», Москва*

Сложные оксиды $Re_2O_3-MeO_2$ ($Re=Dy,Gd$, $Me=Hf,Zr$) применяются в качестве эффективных нейтронопоглощающих материалов и теплозащитных систем, электролитов. Их свойства зависят от структуры: упорядоченной фазы пирохлора или неупорядоченной флюорита. В данной работе исследованы системы $Dy_2Hf_2O_7$, $Gd_2Hf_2O_7$, $Gd_2Zr_2O_7$, имеющие критическое соотношение радиусов ионов, при котором возможен фазовый переход флюорит-пирохлор. Нанопорошки этих соединений с размером частиц от 1 до 50 нм были синтезированы из аморфных прекурсоров при температурах 600-1200 К. Для анализа структуры полученных образцов применялись методы обычной порошковой дифракции (в лабораторных условиях, одновременно с термическим анализом), XAFS (в синхротронных центрах MAXlab, г.Лунд, Швеция, и HASYLAB, DESY, Гамбург, Германия), а также обычной и аномальной дифракции с применением синхротронного излучения (КЦСИ, РНЦ «Курчатовский институт», Москва).

С помощью метода аномальной дифракции удалось уточнить и объяснить особенности структуры образцов, претерпевающих при увеличении температуры отжига переход от аморфной структуры к структуре дефектного флюорита (с различным локальным окружением трех- и четырехвалентного катиона), а затем при накоплении дефектов к иной кристаллографической группе флюорита с удвоенным периодом решетки, промежуточной между структурными группами флюорита и пирохлора. Для анализа экспериментальных спектров поглощения и дифрактограмм был применен метод Байеса (вероятностный подход), который позволяет надежно оценивать точность полученных результатов и определять зависимые параметры обратной задачи. Это позволило уточнить структурные характеристики исследуемых образцов.

Кашурникова Ольга Владимировна

115409, Москва, Каширское шоссе, 31

Тел.: (495)7130661; Факс: (495)3242111 E-mail: okash@mail.ru

ПОЛУЧЕНИЕ, РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$

Э.М. Керимова, С.Н. Мустафаева, Ю.Г. Асадов, Р.Н. Керимов

Институт физики Национальной Академии Наук Азербайджана, Баку

Полупроводниковые кристаллы типа $TiB^{III}C_2^{VI}$ (B-In, Ga; C-S, Se, Te) являются перспективными для применения в нелинейной оптике, создания приемников видимого и ИК - диапазонов спектра, а также рентгенодетекторов. Объектом настоящих исследований являлись монокристаллы твердых растворов $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$. Образцы системы $TiGaSe_2 - TiErSe_2$ готовили сплавлением соединений $TiGaSe_2$ и $TiErSe_2$ в различных соотношениях в кварцевых ампулах. Режим синтеза сплавов выбирали, основываясь на температуре их плавления. Для получения указанных соединений температуру печи поднимали со скоростью 5 К/мин до величины 1300К. После этого через 7-9 часов температуру печи медленно опускали до комнатной. По результатам дифференциально-термического анализа системы $TiGaSe_2 - TiErSe_2$ ($x=0-0.20$) построена диаграмма состояния. Нонвариантная эвтектическая точка соответствует составу $(TiGaSe_2)_{0.85}(TiErSe_2)_{0.15}$ и температуре 950 К. На основе $TiGaSe_2$ растворяется до 10мол% $TiErSe_2$ при температуре эвтектики. При комнатной температуре на основе $TiGaSe_2$ образуются твердые растворы (до 6 мол. %). Рентгенографическое исследование $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$ проведено на порошковом автодифрактометре типа Д8-ADVANCE в режиме $0.5^\circ < 2\theta < 80^\circ$ ($Cu_{K\alpha}$ -излучение; $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$) при 40 кВ. Полученные рентгенодифракционные данные обработаны и уточнены по программам EVA и TOPAZ. Полученные из расчета дифрактограмм значения параметров кристаллической решетки $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$ составляли: $a=10,744$; $b=10,773$; $c=15,623 \text{ \AA}$; $\beta=100,04^\circ$; $z=16$; $\rho=6,446 \text{ г/см}^3$. Изучены частотные зависимости диэлектрических характеристик и ас-проводимости монокристаллов $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$ ($x=0; 0,001; 0,005$ и $0,01$). Установлено, что в области частот $6 \cdot 10^6 - 3,5 \cdot 10^7$ Гц в $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$ имеет место прыжковый механизм переноса заряда по локализованным вблизи уровня Ферми состояниям. Изучено влияние состава монокристаллов $TiGa_{1-x}Er_xSe_2$ на их диэлектрические коэффициенты и параметры локализованных состояний. Показано, что с ростом содержания Er в кристаллах концентрация локализованных состояний и их энергетический разброс увеличиваются, а проводимость, диэлектрическая проницаемость, время и расстояние прыжков уменьшаются.

Керимова Эльмира Мамедали
1143, Баку, пр.Г.Джавида
Тел: (994) 5395913; E-mail: ekerimova@physics.ab.az

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ БИОСТРУКТУРАХ

В.Г. Кириченко, О.В. Коваленко, В.И. Ткаченко

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков

Неоднородные биологические структуры, в частности поверхность крыльев насекомых отличаются большим разнообразием свойств, воспроизведение которых представляет значительную техническую проблему (метод биомиметики). Ввиду малой массы и малой электрической активности поверхности биотемплетов при экспериментальном исследовании электрических свойств материала крыльев насекомых использовали косвенный метод анализа электропроводности. На участок крыла с одной стороны через токовый электрод подавался постоянный электрический потенциал отрицательной полярности величиной (0,9 – 2,5 кВ), а на противоположной стороне с помощью потенциальных электродов регистрировались токи и потенциалы, образующейся на поверхности, обладающей многоострийной хитиновой структурой. В результате экспериментальных исследований было установлено, что в естественных биологических пространственно- неоднородных структурах (ПНС) при косвенном высоковольтном воздействии наблюдаются явления электрического переноса по поверхности структур. Значения токов и потенциалов, полученные при анализе вольт - амперных характеристик значительно флуктуируют при приложении внешнего электрического поля в зависимости от времени регистрации. Наблюдается гистерезис эффекта электропереноса. Характеристики Фаулера-Нордгейма в координатах ($\lg I - 1/U$) указывают, что их наклон существенно изменяется, при переходе из области малых значений наведенного потенциала в область более высоких значений потенциала. При этом коэффициент наклона увеличивается в приведенных координатах от 0,83 до 1,95. Это говорит о значительном изменении характера электропереноса при увеличении потенциала. Отсутствие выхода кривых на плато говорит об отсутствии эффектов насыщения, обычно связанных с формированием пространственного заряда. Ток высокоэнергетической области пропорционален квадрату полного тока эмиссии, при этом коэффициент наклона может изменяться от 1 до 2, что и наблюдается в нашем случае.

Кириченко Валерий Григорьевич, доцент
61108, Украина, Харьков, пр. Курчатова, 31. ФТФ ХНУ.
E-mail: kirichenko@pht.univer.kharkov.ua, val_kir48@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В РЕЗОРЦИНОЛЕ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

С.Е. Кичанов¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, П. Билски²⁾, Я.В. Вонсицки²⁾, Е.В. Лукин¹⁾,
Л.С. Дубровинский³⁾, К. Лате⁴⁾, Б.Н. Савенко¹⁾

¹⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

²⁾ *Университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша*

³⁾ *Bayerisches Geoinstitute, University Bayreuth, D-95440 Bayreuth, Germany*

⁴⁾ *Helmholtz Centre Potsdam, Telegrafenberg, 14407 Potsdam, Гамбург, Германия*

Производство фармакологических объектов включает в себя ряд технологических процессов, каждый из которых может влиять на появление дополнительных, и в том числе, негативных, химических или физических свойств. Так, при формировании таблеток, на исходном фармакологическом материале создается давление до 0.4 ГПа, что является достаточным для развития необратимых фазовых переходов в исходных компонентах.

В представленной работе методом ЯМР-спектроскопии и рентгеновской дифракции исследована структура и атомная динамика резорцинола $C_6H_4(OH)_2$, используемого в производстве антисептических и дерматологических препаратов.

При высоком давлении в резорциноле наблюдается три полиморфных фазовых перехода. Фазовый переход из α фазы в β наблюдается при небольших давлениях ~ 0.7 ГПа, причем этот переход подавляется при быстром сжатии исходного образца. При давлении $P \sim 5$ ГПа наблюдается полиморфный фазовый переход в новую орторомбическую γ фазу. При более высоких давлениях $P \sim 12$ ГПа обнаружена аморфизация резорцинола.

Работа поддержана грантом РФФИ №11-02-00416-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Кичанов Сергей Евгеньевич
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, Объединенный институт ядерных исследований
Тел: (49621)62047; Факс: (49621)65882; E-mail: ekich@nf.jinr.ru

ПОЛУЧЕНИЕ, РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ И МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ СИСТЕМЫ Al-Cu-Fe

М.В.Клюева, В.В. Коровушкин, Н.А.Козловская,
М.А.Черников, Д.А.Шулятев

*Национальный исследовательский технологический университет
«МИСиС», Москва*

Методом твердофазного синтеза получены квазикристаллы системы Al-Cu-Fe с икосаэдрической симметрией. Фазовый состав и структура полученных образцов исследованы с помощью рентгенофазового и рентгеноструктурного анализов, электронной микроскопии и мёссбауэровской спектроскопии. Изучены процессы фазообразования в ходе твердофазного синтеза. Показано, что в процессе синтеза образуются моноклинная, кубическая и икосаэдрическая фазы. Определены условия получения однофазных образцов икосаэдрической фазы. Анализ мёссбауэровских спектров показал, что получающаяся в результате твердофазного синтеза икосаэдрическая фаза имеет гранецентрированную структуру.

Клюева Мария Вячеславовна, студент
119049, Москва, Ленинский проспект, д. 4
Тел.: 8(916)7986293; Факс: 8(499)2365495; E-mail: 23sh82vd@gmail.com

**СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАНГАНИТЕ
Pr_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ**

Д.П.Козленко¹⁾, Т.Н. Данг¹⁾, С.Е.Кичанов¹⁾, Б.Н.Савенко¹⁾

¹⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия*

Перовскито-подобные манганиты $A_{1-x}A'_xMnO_3$ (A - редкоземельный, A' – щелочно-земельные элементы) проявляют большое разнообразие магнитных и электронных свойств в зависимости от типа A' – элемента, его содержания и от внешних условий. В данной работе представлен результат исследования влияния высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру манганита $Pr_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ с помощью нейтронной и рентгеновской дифракции и Рамановской спектроскопии.

Манганит $Pr_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ имеет орторомбическую кристаллическую структуру с пространственной группой $Pnma$. С повышением давления до $P \approx 7$ ГПа наблюдается структурный фазовый переход в более симметричную орторомбическую кристаллическую структуру с пространственной группой $Imma$.

При понижении температуры до $T \approx 272$ К происходит фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние. При давлении $P = 1.9$ ГПа с понижением температуры до $T \approx 138$ К возникает новая антиферромагнитная фаза А-типа, которая сосуществует с ферромагнитной фазой до 5 ГПа. Температуры перехода из парамагнитного в ФМ и в АФМ слабо зависят от давления.

Работа поддержана грантом МД-696.2010.2, гранта РФФИ №09-02-00311-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Данг Нгок Тоан, аспирант
141980, Московская область, Дубна, ул. Жолио-Кюри 6
Тел: 8 (49621)66494; Факс: 8(49621)65882; E-mail: dangtoan2107@jinr.ru

ИЗУЧЕНИЕ РАВНОВЕСНОЙ ФОРМЫ ПЕРЕШЕЙКА, ВОЗНИКАЮЩЕГО В ПРОЦЕССЕ КОАЛЕСЦЕНЦИИ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ

А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, П.В. Комаров, Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, Тверь

В природе и технике широко распространены системы, в которых дисперсные твердые частицы или газовые пузыри соединены прослойками (манжетами) жидкости. Прилипая к частицам, жидкость искривляет мениск и, в зависимости от условий смачивания, стягивает или расталкивает их. Эти капиллярные силы существенно влияют на протекание многих технологических процессов и в значительной мере определяют качество готовой продукции (жидкофазное спекание порошков в металллокерамике и силикатной технологии, сцепление частиц между собой и с поверхностью изделий при нанесении защитных покрытий) [1]. При рассмотрении процесса коалесценции двух сферических частиц радиусом r и массой m и последующим плавлением возможно даже провести оценку для минимального диаметра частиц d_{\min} [2]:

$$d_{\min} = \frac{3 \left[2\sigma_{sg} - (\rho_s / \rho_l)^{2/3} \sigma_{lg} \right]}{\rho_s \left[C_p (T_{melt} - T) + \lambda \right]}, \quad (1)$$

где σ_{sg}, σ_{lg} - удельная поверхностная энергия границ раздел «твердое тело-газ» и «жидкость-газ», ρ_s, ρ_l - плотности твердой и жидкой фаз, C_p, λ, T_{melt} - теплоемкость, теплота плавления и температура плавления соответственно.

В данной работе методом Монте-Карло проведено моделирование процесса коалесценции с целью выяснения равновесной формы перешейка между сферическими наночастицами металлов с различным числом частиц (схематически исследуемая система показана см. рис. 1). Взаимодействие между наночастицами металла задавалось в виде потенциала Гупта [3]

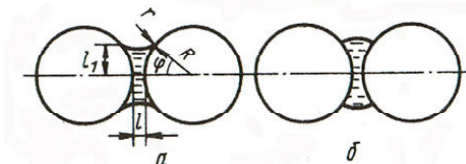


Рис. 1. Схема контакта двух сферических наночастиц.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

1. Степанов Ю.Н., Алымов М.И. // Металлы. 2005. № 1. С. 34.
2. Алымов М.И., Аверин С.И., Коробанов А.А. // Перспективные материалы. 2006. №3. С. 53.
3. Gupta R.P. // Physical Review B. 1981. V. 23. №. 12. P. 6265.

Колосов Андрей Юрьевич
170100, Тверь, ул. Желябова, 33. Тверской государственный университет
Тел.: (4822)585343 (доб. 106); E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЙ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В НОВОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ GdOFeAs МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Н.Ю. Коротков¹⁾, К.В. Фролов¹⁾, И.С. Любутин¹⁾, Е.П. Хлыбов²⁾, В.М. Пудалов³⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

³⁾ *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

Открытые в начале 2008 г. новые слоистые сверхпроводящие соединения оксипниктиды на основе FeAs с максимальной критической температурой $T_C \approx 55$ К представляют значительный интерес как для более глубокого теоретического понимания механизмов ВТСП, так и в связи с надеждой на дальнейший прогресс в синтезе перспективных высокотемпературных сверхпроводников.

Новые сверхпроводящие соединения имеют более простую по сравнению с купратами слоистую кристаллическую структуру, при этом показано, что формирование сверхпроводимости происходит в двумерных слоях, содержащих ионы железа и мышьяка. Наличие магнитного иона железа в сверхпроводящем слое представляет интерес с точки зрения предложенных ранее "магнитных" механизмов высокотемпературной сверхпроводимости.

В данной работе представлены результаты исследования нового сверхпроводящего соединения GdOFeAs с $T_C = 53$ К, допированного фтором. Измерения выполнены методом мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe в интервале температур 5 - 295 К с использованием источника излучения ^{57}Co в стандартной схеме поглощения в режиме постоянных ускорений.

Результаты экспериментов указывают на существование магнитно-упорядоченной примесной несверхпроводящей фазы FeAs с температурой магнитного фазового перехода около 75 К. Обнаружено наличие двух неэквивалентных позиций ионов железа, принадлежащих сверхпроводящей фазе соединения GdOFeAs. Установлено, что ионы железа в сверхпроводнике остаются немагнитными во всём интервале температур 5 – 295 К.

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты 11-02-00636 и 11-02-12089-офи-м.

Коротков Николай Юрьевич

119333, Москва, Ленинский просп., д.59

Тел.: 8(495)3308329; Факс: 8(499)1351011; E-mail: irish.wire@gmail.com

КРИСТАЛЛЫ KDP С ИНКОРПОРИРОВАННЫМИ НАНОНИТЯМИ $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

А.В. Косинова, И.М. Притула, М.И. Колыбаева, В.Ф. Ткаченко

Институт монокристаллов НАН Украины

Поиск новых эффективных материалов для оптоэлектронной и лазерной техники обуславливает повышенный интерес исследователей к композиционным наноструктурным нелинейно-оптическим материалам. Введение наночастиц металлов и металлооксидов в диэлектрическую матрицу является перспективным методом создания композиционных материалов, функциональные свойства которых можно контролировать путем варьирования соотношения исходных компонентов, размера и типа вводимых наночастиц.

В настоящей работе представлены результаты исследований влияния нанонитей оксигидроксида алюминия $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (5×150 нм) на структурное совершенство и оптическую однородность кристалла KDP. В процессе роста наблюдался преимущественный захват нанонитей призматическими секторами роста кристалла. С помощью оптической микроскопии в секторе роста $\{100\}$ кристалла KDP выявлено наличие протяженных полос, параллельных фронту кристаллизации и обусловленных захватом нанонитей. Присутствие нанонитей $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ в матрице KDP подтверждено результатами рентгеноструктурного анализа. Показано, что захват нанонитей сопровождается появлением в матрице полукогерентных границ между пакетами слоев роста, наличие которых не существенно сказывается на структурном совершенстве кристаллов. С помощью методов избирательного травления проанализирована дислокационная структура выращенных кристаллов.

Исследовано влияние нанонитей на величину аномальной двуосности и оптическую прозрачность кристалла в диапазоне длин волн 200-1100 нм. Для сектора роста $\{100\}$ характерно наличие полосы поглощения на $\lambda=270$ нм, обусловленной присутствием в матрице нанонитей $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$. Характер взаимодействия нанонитей $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ с матрицей KDP и его проявление в изменении нелинейно-оптических свойств кристалла будут предметом дальнейших исследований.

Косинова Анна Владимировна
61001, Харьков, пр. Ленина, 60
Тел.: (057)3410157; E-mail: Annett@isc.kharkov.ua

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ДВОЙНИКОВАНИЕ КРИСТАЛЛА ЛАНГАСИТА

О.М. Кугаенко¹⁾, В.С. Петраков¹⁾, Н.Ю. Табачкова¹⁾, С.С. Уварова¹⁾
О.А. Бузанов²⁾, В.Н. Егоров²⁾, С.А. Сахаров²⁾

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

²⁾ *ОАО «Фомос-Материалс», Россия*

Кристаллические элементы из лантан-галлиевого танталата (ГТЛ, $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$) применяются в качестве чувствительных пьезоэлементов датчиков давления и вибрации при температурах до 1000 С. Кристаллы ГТЛ были выращены на предприятии ОАО «Фомос-Материалс» по методу Чохральского.

В работе исследовано изменение структуры при термических воздействиях.

При испытаниях на термостойкость монокристаллических пьезоэлементов ЛГТ путем термоудара при закалке в воду выявлено, что при закалке от 100 С в микроструктуре образца образуется повышенная плотность дислокаций и появляются двойники, а выше 150 С - происходит разрушение образца путем растрескивания. Внутренние термические напряжения в лангатате при термоударе от этих температур достигают 100 – 300 МПа.

Рентгеноструктурный анализ выполнен методом дифракции рентгеновских лучей с помощью дифрактометра D8 Discover, оснащенного сцинтилляционным детектором Bruker, при симметричной съемке θ - 2θ с использованием $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1,54178 \text{ \AA}$).

Рентгеноструктурные исследования влияния термоудара на структуру проведены на образцах в виде тонкой монокристаллической пластины лантан-галлиевого танталата на оптически полированной поверхности. Образец был подвергнут термоудару: нагрет до температуры 220 С, выдержан при этой температуре в течение 20 минут и закален в воде комнатной температуры. На прямой полюсной фигуре (10.0) наблюдаются дополнительные отражения, составляющие с центром полюсной фигуры угол 60 град. Появление данных полюсов может быть связано с двойникованием кристалла в процессе термоудара. Плоскость двойникования (11.0).

Таким образом, релаксация термических напряжений, возникших вследствие резкого охлаждения, происходит путем двойникования, образования и скольжения дислокаций и разрушения.

Кугаенко Ольга Михайловна, к.ф.-м.н.
119049, Москва, Ленинский просп., д. 4
Тел.: 8(499)2366500; E-mail: crystalXXI@misis.ru

СТРУКТУРА И УСЛОВИЯ ОБРАЗОВАНИЯ НОВОГО ГИДРАТА ВОДОРОДА

М.А.Кузовников¹⁾, В.С.Ефимченко¹⁾, В.К.Федотов¹⁾, С.С.Хасанов¹⁾, М.Ткаcz²⁾

¹⁾ *Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка*

²⁾ *Institute of Physical Chemistry PAS, Warsaw*

В системе $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$ при -20°C и давлении водорода 5кбар открыт новый водородный гидрат, названный C_0 . Порошковые образцы гидрата были закалены под высоким давлением до температуры жидкого азота. Термодесорбция в вакуум показала, что выделение водорода из закалённых образцов начинается при нагреве выше 77К и заканчивается при 170К. Общее количество выделившегося водорода достигало молекулярного отношения $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}\approx 0.13$. Рентген-дифракционное исследование при 80К показало, что образцы были однофазными и имели тригональную структуру с $a=6.33\text{\AA}$ и $c=6.20\text{\AA}$ в гексагональных осях.

Кузовников Михаил Александрович

142432, Московская обл., Черноголовка, ул.Академика Осипяна д.2,

Тел.: 8(496)5225360; Факс: (499)4331511; E-mail: kuz@issp.ac.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КАРБОНИЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ Fe_n ($n=1-6$) МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

О.В. Куликова, А.В. Козинкин, В.Г. Власенко

НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

Электронное строение ряда карбонильных кластеров железа $Fe_nA(CO)_m$, где $n/m=1/5, 2/9, 3/12, 4/12$ ($A=N$), $5/14$ ($A=C$), $6/16$ ($A=C$), исследовано методами рентгеновской эмиссионной спектроскопии и квантовохимических расчетов в приближении теории функционала плотности. Получены $FeK\beta_{1\beta'}$ и $FeK\beta_5$ -рентгеновские эмиссионные спектры, которые отвечают электронным переходам $3p \rightarrow 1s$ и $4p \rightarrow 1s$, соответственно. Как известно, по характеристикам $FeK\beta_{1\beta'}$ спектра (энергетическому положению, полуширине и индексу асимметрии) можно оценить спиновое состояние атомов железа в соединениях, а тонкая структура $FeK\beta_5$ -спектра определяется распределением валентных p электронов железа по МО соединения и дают информацию о деталях химической связи.

Из анализа $FeK\beta_{1\beta'}$ -спектров исследованных карбонильных кластеров было установлено, что во всех соединениях атомы железа находятся в нульспиновом состоянии. Тонкая структура $FeK\beta_5$ -спектров, в целом, имеет схожее строение для всех соединений и определяется взаимодействием валентных p -электронов железа с $4s$, 1π и 5σ МО карбонильных групп. Однако, для комплексных полиэдров $Fe_nA(CO)_m$ $n/m= 4/12$ ($A=N$), $5/14$ ($A=C$), $6/16$ ($A=C$) обнаружено проявление в $FeK\beta_5$ -спектрах взаимодействий $2s$ АО азота и углерода координационного центра с p -орбиталями железа. Установлена также тенденция уменьшения энергии коротковолнового компонента $FeK\beta_5$ -спектра, отвечающего $p-d$ смешиванию АО железа в соединении, в зависимости от величины их нуклеарности n .

Квантовохимические расчеты в приближении теории функционала плотности (B3LYP/TZVP, программа Gaussian-03) позволили провести детальную интерпретацию тонкой структуры $FeK\beta_5$ -спектров и проанализировать изменения в электронном строении в ряду исследованных карбонильных кластеров железа. Построенные на основе расчетов теоретические рентгеновские эмиссионные $FeK\beta_5$ -спектры в деталях соответствовали эксперименту.

Куликова Ольга Витальевна, заведующий лаборатории
344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, д.194
Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: kov@sfnedu.ru

ДИНАМИКА СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ ЦИРКОНИЯ

С.Н.Кульков

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томский госуниверситет

Изучены особенности фазового состава и структуры нанокристаллических порошков на основе диоксида циркония при нагреве. Показано, что существуют размерные изменения параметров решётки, по сравнению с крупнокристаллическим состоянием, проявляющиеся при размере ОКР менее 25 нм и приближающие её структуру к структуре кубической фазы. При размере среднем размере ОКР менее 40 нм наблюдаются также упругие искажения приграничных областей кристаллитов, регистрируемые в дифракционных экспериментах как микроискажения. Показано, что содержание моноклинной модификации обусловлено уровнем микроискажений решётки, носящих при нагреве осциллирующий характер, что связано с уменьшением величины критического размера кристаллитов тетрагональной фазы, т.е. фазовый состав данного материала определяется уровнем микроискажений решетки. Релаксация микроискажений при отжиге приводит к увеличению критического размера кристаллитов тетрагональной фазы, в результате чего моноклинная фаза в нём исчезает.

Кульков Сергей Николаевич, д.ф.-м.н.
634021, Томск, ул. пр. Академический, д. 2/4
Тел.: 8(3822)508898; Факс: 8(3822)286986; E-mail: kulkov@ms.tsc.ru

X – RAY HOLOGRAM AND ION BEAM OPTICS FOR 3D IMAGE RECORDING

A.V. Kuyumchyan^{1), 2)}, D. A. Kuyumchyan³⁾, V.V. Aristov¹⁾, E.V. Shulakov¹⁾

¹⁾ *Institute of Microelectronics Technology, RAS, 142432, Chernogolovka, Russia*

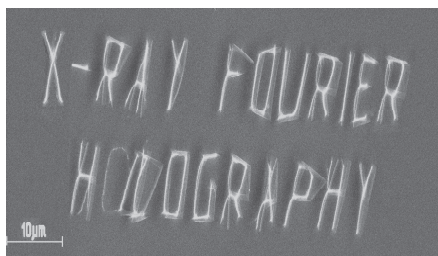
²⁾ *American NanoScience and Advanced Medical Equipment, Inc, CA 91206, USA*

³⁾ *California State University, Northridge, CA 91330, USA*

X-ray microscopy is a powerful imaging method for life, materials and environmental sciences. High-resolution 3D images of nano size and biological samples are currently made by: ZP X-ray microscopy, transmission electron microscopy and atomic-force microscope. In this paper, we describe a new special geometry for recording hard X-ray hologram with using crystal ZP. Two objects have been tested in this study. First type for development nanotechnology and the second type for visualization of images damaged spinal cord of adult rat. First objects consisted of the word-combination “X - Ray Fourier hologram”. They were prepared on the silicon crystal membranes by electron-beam lithography and ion-plasma etching. In this case the hologram produces by means of zero and first order of ZP. We used zero order as an object wave E_S and first order as a basic wave E_B . Behind the test object an interference image (hologram) is formed which is recorded by a photo resist with the resolving $1\mu\text{m}$. The process of reconstructing 3D real image consists of illuminating the hologram with a same basic wave E_B . After illuminating the hologram wave E_B we recorded intensity $I(x, y)$. The theoretical and experimental results to retrieval hologram at the X-ray energy 8 keV are shown Figure 1a, b.



Fig.1 a)



b)

We used focused ion beam, also known as FIB for reproduction three dimension structures of damaged spinal cord of rats that received a lateral hemi section injury and treatment with engineered neurotrophin-3 (NT-3). This FIB technique had been used particularly in the semiconductor and materials science fields for site-specific analysis. The common smallest beam size of FIB is 2.5 - 6 nm. In this study we have attempted to visualize the damaged spinal cords of experimental animal that received gene therapy with NT-3.

Dr. Kuyumchyan Armen

142432, Chernogolovka, Institutskaya 6

Tel.: (496)5244276; Fax: (496)9628047; E-mail: Arkuyumchyan@inbox.ru

ОТ f-ЭЛЕКТРОННОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ К МАГНИТНОМУ ПОРЯДКУ: НЕЙТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ в $\text{EuCu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$

В.Н. Лазуков¹⁾, П.А. Алексеев^{1,2)}, К.С. Немковский^{1,3)}, А.В. Грибанов⁴⁾, А.П. Менушков²⁾, А.В. Ярославцев^{2,1)}, Ж.-М. Миньо⁵⁾, Е.С. Клементьев¹⁾, А.А. Никонов¹⁾, Р. Стюарт⁶⁾, Р. Бюли⁶⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²⁾ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия

³⁾ Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich, Germany

⁴⁾ Химфак МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

⁵⁾ Laboratoire Léon Brillouin, CEA/Saclay, Gif sur Yvette, France

⁶⁾ ISIS, Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, UK

Неупругое магнитное рассеяние нейтронов позволяет изучить детали спектра магнитных возбуждений систем с необычными типами основных состояний, и тем самым установить природу и условия формирования их физических свойств. Серия соединений $\text{EuCu}_2\text{Si}_x\text{Ge}_{2-x}$ представляет уникальную возможность среди множества самариевых и европиевых систем для реализации непрерывного перехода между валентнонестабильным, тяжелофермионным и магнитоупорядоченным состояниями. При этом вблизи $X \sim 0.7$ реализуется состояние типа квантовой критической точки. В докладе представлены результаты исследования спиновой динамики в системах $\text{EuCu}_2\text{Si}_x\text{Ge}_{2-x}$ ($X=1, 0.9, 0.75, 0.6$) методом неупругого рассеяния нейтронов, и валентного состояния Eu методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии, выполненные в области температур 5-300K. При $X=1$, когда валентность близка к $3+$ (температура низкая), в спектре магнитных возбуждений наблюдается двухпиковая структура в области энергий заметно ниже энергии спин-орбитального перехода ${}^7F_0 \rightarrow {}^7F_1$, Eu^{3+} , при этом один из пиков может быть соотнесен с перенормированным спин-орбитальным возбуждением. Уменьшение валентности европия за счет роста температуры, или за счет роста концентрации Ge приводит к дальнейшему понижению энергии и постепенному подавлению пиков в спектре, при этом проявляется и усиливается вклад от квазиупругого сигнала, который может быть соотнесен со спиновыми флуктуациями для двухвалентной конфигурации.

Природа спектральных особенностей и их эволюция обсуждаются с позиций экситонной модели промежуточновалентного состояния.

Работа поддержана Грантом РФФИ 11-02-00121.

Лазуков Владимир Николаевич, к.ф.-м.н.
123182, Москва, пл. Ак.И.В.Курчатова, д. 1
Тел.: 8(499)1967662; E-mail: lvnl@isssp.kiae.ru

**ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ
В ОБЛУЧЕННОМ НЕЙТРОНАМИ СИНТЕТИЧЕСКОМ КВАРЦЕ
МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ**

В.М.Лебедев¹⁾, В.Т.Лебедев¹⁾, С.П.Орлов¹⁾, Б.З.Певзнер²⁾, И.Н.Толстихин³⁾

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

²⁾ *ООО «Лаборатория свойств стекла», Санкт-Петербурге*

³⁾ *Институт геологии Кольского НЦ РАН, Апатиты*

Кварцевые породы, входящие в состав Земной коры, играют важную роль в накоплении и диффузии изотопов гелия и водорода к поверхности планеты. Для количественного описания подобных явлений необходимо знание общих закономерностей зарождения и развития повреждений в кварцах. Облученный быстрыми нейтронами искусственный кварц, имеющий изначально небольшое количество дефектов, является хорошей моделью для изучения подобных процессов.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов продолжены исследования надатомной структуры кристаллов искусственного кварца, облученных быстрыми нейтронами реактора ($E_n > 0,1$ МэВ) флюенсами, большими 10^{19} н/см². В облученных образцах наблюдаются объемные, точечные и протяженные дефекты, созданные выбитыми из узлов решетки ионами кислорода и кремния. Эти структуры формируют в кварце связную сетку каналов с ячейкой ~30 нм, по которым возможна миграция газов и жидкостей.

Эти результаты коррелируют с полученными ранее данными о надатомной структуре облученных кварцев при меньших флюенсах нейтронов [1]. Полученные данные о структуре сопоставлены с результатами других методов (малоугловое рентгеновское рассеяние, комбинационное рассеяние, денсиметрия, рентгенофазовый анализ на больших углах).

1. В.М.Лебедев и др. // ФТТ. 2010. Т. 52. Вып. 5. С. 937-941.

Лебедев Виктор Михайлович, с.н.с.
188300, Ленинградская область, г. Гатчина, Орлова роща.
Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН
Отдел исследования конденсированного состояния
Тел.: (813)7146684; Факс: (813)7139023; E-mail: lebedev@pnpi.spb.ru

СТРУКТУРА И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И НАНОКРЕМНИЯ

С.В.Логинова, В.Б.Пикулев

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

Нанокompозиты на основе матрицы из целлюлозных волокон активно исследуются, ориентируясь на широкую сферу практического использования целлюлозосодержащих материалов. Нанокремний получил широкую известность в связи с его уникальными люминесцентными свойствами, описываемыми квантоворазмерными эффектами в Si нанокристаллах. Нами синтезирована новая композитная структура, в которой оба вышеуказанных компонента присутствуют в нанокристаллическом состоянии с областями однородного распределения в десятки микрон. Исходными материалами для получения композита являлись микрокристаллическая целлюлоза и пористый кремний. Полученный класс материалов обладает люминесцентными характеристиками, присущими как нанокремнию, так и продуктам окисления целлюлоз, при этом вид спектральных кривых сильно зависит от особенностей технологии приготовления образцов.

Рентгенографирование образцов проводилось на дифрактометре ДРОН-6.0 на CuK α -излучении в симметричной и асимметричной геометрии. Выбор модели атомного строения целлюлозной матрицы проводился методом полнопрофильного анализа. Оценка степени кристалличности компонентов нанокompозита, проведенная методами ИК-спектроскопии и рентгенографии, составила ~ 77%. Расчет размеров областей когерентного рассеяния в различных кристаллографических направлениях выполнялся по формуле Шеррера.

Установлено, что целлюлозная составляющая может быть описана в рамках модели I β с параллельным ир расположением целлюлозных цепочек. Толщина и длина упорядоченных областей элементарных фибрилл порядка 50 Å.

Методами рентгенографии, ИК-спектроскопии и рентгеновского флуоресцентного микроанализа показано, что в результате синтеза происходит встраивание наночастиц кремния в целлюлозную матрицу.

Логинова Светлана Владимировна, к.ф.-м.н., доцент
185910, Карелия, г. Петрозаводск, пр. Ленина, д. 33
Тел.: (8142)719663; Факс: (8142)719663; E-mail: svlog@psu.karelia.ru

ПОЛИМОРФНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ХЛОРПРОПАМИДЕ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Н.В. Лошак^{1),2)}, С.Е.Кичанов¹⁾ Д.П.Козленко¹⁾, Я.В.Вонсицки³⁾, Е.В. Лукин¹⁾, К. Лате⁴⁾,
Б.Н.Савенко¹⁾

¹⁾Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия

²⁾ Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³⁾ Университет им. А.Мицкевича, Познань, Польша

⁴⁾ Helmholtz Centre Potsdam, Telegrafenberg, 14407 Potsdam, Гамбург, Германия

Изучение влияния высокого давления на структуру и динамику фармакологических компонентов является одной из важнейших задач физики конденсированного состояния. Удобным объектом исследования является хлорпропамид $C_{10}H_{13}ClN_2O_3S$. В этом соединении наблюдается пять полиморфных форм в зависимости от условий синтеза или температуры. До сих пор полиморфных фазовых переходов в этом соединении при высоком давлении не наблюдалось.

В работе методом рентгеновской дифракции впервые обнаружен полиморфный фазовый переход в хлорпропамиде при высоких давлениях $P=1.2$ ГПа. Установлено, что фаза высокого давления является моноклинной полиморфной формой γ хлорпропамида с пространственной группой $P2_1$. Получены параметры элементарной ячейки полиморфных форм α и γ хлорпропамида и рассчитаны их барические коэффициенты.

Работа поддержана грантом РФФИ №11-02-00416-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Лошак Наталия Васильевна, студент
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, Объединенный институт ядерных исследований
Тел: (49621)62047; Факс: (49621)65882; E-mail: jasmin306@ukr.net.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ LAMNOЗ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Е.В. Лукин¹⁾, Д.П. Козленко ¹⁾, С.Е. Кичанов ¹⁾, Б.Н. Савенко ¹⁾

¹⁾*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Перовскитоподобные манганиты $R_{1-x}A_xMnO_3$ (R - редкоземельный, A - щелочноземельный элементы) проявляют большое разнообразие физических свойств в зависимости от типа R, A - элементов и концентрации x. Сильная корреляция магнитных, электронных и транспортных свойств манганитов приводит к их высокой чувствительности к внешним воздействиям – изменению температуры, приложению магнитных полей и высокого давления. Удобным модельным объектом для исследования влияния высокого давления на кристаллическую структуру и связанные с ними физические свойства является манганит $LaMnO_3$.

Методом нейтронной дифракции исследована атомная и магнитная структура манганита $LaMnO_3$ при высоких давлениях до 4.8 ГПа в диапазоне температур 10 – 300 К. При нормальном давлении и температуре $T_N=140$ К в $LaMnO_3$ формируется антиферромагнитное (АФМ) состояние А-типа. Такое магнитное упорядочение сохраняется во всем исследуемом диапазоне давлений до 4 ГПа. В работе получены барические зависимости параметров и объема элементарной ячейки, межатомных связей и валентных углов и упорядоченного магнитного момента марганца.

Работа поддержана грантом МД-696.2010.2, гранта РФФИ №09-02-00311-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Лукин Евгений Валерьевич, инженер
141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, Объединенный институт ядерных исследований
Тел: (49621)62047; Факс: (49621)65882; E-mail: lukin@jinr.ru

ОБРАЗОВАНИЕ СВЕРХСТРУКТУРНЫХ ФАЗ СОЕДИНЕНИЙ $\text{AgGaS}_2(\text{Se}_2)$

А.Ч. Мамедова, Д.И. Исмаилов

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

Определены условия формирования тонких наноразмерных пленок $\text{AgGaS}_2(\text{Se}_2)$ с различными субструктурами – аморфных, поликристаллических текстурированных и мозаичных монокристаллических пленок высокого совершенства.

Электроннографическими исследованиями впервые экспериментально установлены условия существования сверхструктурных фаз соединений составов $\text{AgGaS}_2(\text{Se}_2)$, обладающие сверхпериодами. Показано, что сверхрешетки формируются в результате эпитаксиального роста AgGaS_2 и AgGaSe_2 на монокристаллических подложках NaCl и NaBr соответственно. Периоды элементарных ячеек (ЭЯ) кристаллических решеток исходных и сверхструктурных фаз находятся в простых соотношениях AgGaS_2 : $a_{\text{св.стр}} \approx 3a_0 = 1,71$ нм; $c_{\text{св.стр}} \approx 2c_0 = 2,023$ нм; AgGaSe_2 : $a_{\text{св.стр}} \approx 4a_0 = 2,375$ нм; $c_{\text{св.стр}} \approx 3c_0 = 3,260$ нм.

Установлено, что сверхструктурные фазы ориентируются плоскостями (100) AgGaS_2 параллельно граням (100) NaCl и (100) AgGaSe_2 параллельно граням (100) NaBr соответственно. Сверхрешетка AgGaS_2 сопрягается с девятью ячейками NaCl , а кристаллическая решетка сверхструктуры AgGaSe_2 входит в сопряжение с шестнадцатью ЭЯ монокристаллического NaBr . Относительное несоответствие периодов сопрягающих кристаллических решеток составляет ~2%. Обе сверхструктуры описываются с пространственной группы симметрии $P4_2 - C_4^8$.

Мамедова Айнура Чингизовна, ph.d

Аз - 1143, Баку, пр.Г.Джавида, д.33

Тел.: 994(12)4395140; Факс: 994(12)4470456; E-mail: amamedova@hotmail.ru

**ИЗУЧЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ ВАРИАЦИИ ПАРАМЕТРА РЕШЕТКИ
МОНОКРИСТАЛЛОВ СРЕДНИХ СИНГОНИЙ МЕТОДОМ
КОМПЛАНАРНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ РЕФЛЕКСОВ**

Н.В. Марченков, А.Ю. Серегин, А.Е. Благов

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

Экспериментальное определение параметров кристаллической решетки является одной из традиционных задач рентгеновской дифрактометрии. Для изучения реальной структуры необходимы методы определения локальных значений параметров решетки и их вариаций.

Весьма практичным и удобным является метод прецизионного определения параметров решетки, основанный на измерении углового расстояния между двумя отражениями, для которых выполняется или почти выполняется условие компланарной многоволновой дифракции. Существенным достоинством этого метода является возможность определения на лабораторном источнике локальных изменений параметра решетки с высоким пространственным разрешением. Метод был разработан для измерения параметров кристаллов кубической сингонии. Настоящая работа посвящена развитию указанного метода – прежде всего изучению его особенностей для исследования кристаллов средних сингоний.

Прецизионность определения параметра решетки может достигать $10^{-5} - 10^{-6}$. Следует отметить, что поворот кристалла на малый угол $\psi_0 < 1^\circ$, выполняемый при измерениях практически не влияет на локальность метода.

Для определения относительного изменения параметра кристаллической решетки записывались кривые дифракционного отражения (КДО) от двух семейств атомных плоскостей в разных точках вдоль поверхности исследуемого кристалла. В рамках поставленной задачи было проведено две серии измерений: с крупным шагом вдоль всего исследуемого образца и с маленьким шагом на небольшом участке кристалла. Задача по расчету параметра решетки из величины углового расстояния между пиками КДО была решена численно.

На основе полученных результатов можно оценить степень совершенства исследуемых кристаллов и, как следствие, скорректировать процесс их выращивания с целью получения более качественных образцов.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки ГК 16.518.11.7026.

Марченков Никита Владимирович

119234, Москва, ул. Ленинский проспект, д. 59

Тел.: 8(917)5759316; E-mail: 1414-88@mail.ru

САМОСБОРКА ПЕРВИЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ЧАСТИЦ АМОРФНОГО ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

В.М. Масалов¹, Г.А. Емельченко¹, Е.А. Кудренко¹, В.В. Роддатис²

¹ Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка Московской обл.

² Российский научный центр "Курчатовский институт", Москва

Известно, что частицы аморфного высокодисперсного кремнезема являются биосовместимыми и биологически не деградируемыми, перспективными в качестве внутрисосудистых носителей для локального терапевтического воздействия. В основе терапевтического действия аморфного высокодисперсного кремнезема лежит его способность к сорбции веществ белковой природы (кремнезем сорбирует на три порядка больше белковых соединений по сравнению со всеми известными сорбентами), токсинов, микроорганизмов, низкомолекулярных соединений, а также высокая гидрофильность и осмотическая активность.

На основе полученных данных по исследованию пористости опаловых матриц, сложенных сферическими частицами диоксида кремния в диапазоне размеров от 70 до 2200 нм, а также прямого изучения наноструктуры частиц с помощью высокоразрешающей электронной сканирующей и просвечивающей микроскопии в работе экспериментально доказана «трёхуровневая, иерархическая» внутренняя структура субмикронных сферических частиц диоксида кремния, полученных методом гидролиза тетраэтоксисилана. Предложенная модель структуры частицы в форме сферических концентрических оболочек с ядром размером около 370 нм была подтверждена экспериментально методом прерванного роста частиц и исследования их сечений с помощью просвечивающей микроскопии. Показано, что рост частиц до диаметра ~ 370 нм происходит путём агрегационной самосборки первичных частиц размером 5÷10 нм, а в дальнейшем путем присоединения вторичных частиц размером 30÷40 нм, которые также сформированы первичными частицами и которые формируют оболочечную структуру коллоидных частицы SiO₂. Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН №21 "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов".

Масалов Владимир Михайлович

142432, г.Черноголовка, Московской обл., ул. Академика Осипьяна, д.2

Тел.: (49652)22403; Факс: (49652)24693; E-mail: masalov@issp.ac.ru

XAFS-СПЕКТРОСКОПИЯ МАГНИТНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ФОСФИДОВ КОБАЛЬТА

А.П.Менушенков¹⁾, А.А.Ярославцев^{1,2)}, О.В.Гришина¹⁾, Р.В.Черников³⁾, К.А.Ковнир⁴⁾,
М.М.Шатрук⁴⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *HASYLAB, DESY, Гамбург, Германия*

⁴⁾ *Университет штата Флорида, Таллахасси, Флорида, США*

Особенности локальной кристаллической и электронной структуры были исследованы при помощи XAFS- спектроскопии в зонных магнетиках $R\text{Co}_2\text{P}_2$ ($R = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Eu}$). Магнитное упорядочение в подобных материалах обусловлено особенностями электронной зонной структуры вблизи уровня Ферми и может быть изменено, например, путём приложения внешнего давления к образцу [1]. Но такое же воздействие может быть достигнуто и с помощью частичного неизозэлектронного замещения РЗЭ, создающего в решётке химическое давление. При этом изученные в работе Се-замещённые фазы LaCo_2P_2 ($T_C = 132 \text{ K}$ [2]) обладают иным поведением магнитных параметров, нежели Pr- и Nd-замещённые. Другое исследованное соединение $\text{Pr}_{0.8}\text{Eu}_{0.2}\text{Co}_2\text{P}_2$ является ферромагнетиком ($T_C = 290 \text{ K}$), в то время как чистые PrCo_2P_2 и EuCo_2P_2 являются антиферромагнетиками.

Спектры рентгеновского поглощения были получены на линии С синхротронного центра HASYLAB (DESY, Гамбург, Германия) в режиме пропускания выше L_3 - краёв поглощения редкоземельных элементов и K - края поглощения кобальта. Анализ L_3 -XANES спектров РЗЭ и протяжённых EXAFS-спектров РЗЭ и Со показал наличие у Eu и Се промежуточной валентности, зависящей от температуры и концентрации легирующего компонента, расщепление координационных сфер РЗЭ вокруг Со и температурные изменения межатомного расстояния Се/Eu-Со, характеризующего взаимодействие $4f$ электронных состояний РЗЭ с $3d$ состояниями кобальта. Все результаты указывают на то, что достигаемое в решётке химическое давление приводит к быстрым флуктуациям электрона между локализованными $4f$ и делокализованными $3d$ состояниями, воздействующим на электронную зонную структуру. Это и является причиной резкого изменения магнитных свойств веществ. Работа частично поддержана РФФИ (грант № 11-02-01174-а), и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (ГК № 16.740.11.0139).

Менушенков Алексей Павлович, профессор

115409, Москва, Каширское ш., д.31

Тел.: (495)3239020; Факс: (495)3242111; E-mail: menushen@htsc.mephi.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОПОРОШКА ФЕРРИТА КОБАЛЬТА

Ю.А.Миргород¹⁾, Н. А.Борщ¹⁾, В.М.Федосюк²⁾, Г.Ю.Юрков³⁾

¹⁾*Юго-Западный государственный университет*

²⁾*ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»,
Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси*

³⁾*Учреждение Российской академии наук Институт металлургии и
материаловедения им. А. А. Байкова РАН*

Разработан метод получения наночастиц в системе прямых мицелл амфифилов с использованием ионной флотозэкстракции для концентрирования ионов из разбавленных водных растворов. В частности, получены наночастицы состава CoFe_2O_4 со структурой, близкой к структуре шпинели. Наночастицы охарактеризованы методами XR, EDX, TEM, cryogenic high field measurement system. Частицы состоят из двух компонент: хорошо сформированной фазы феррита кобальта CoFe_2O_4 и ее аморфного аналога. Наночастицы имеют максимум распределения по размеру в диапазоне от 4 до 6 нм и на углеродной подложке самоорганизуются в периодическую коллоидную структуру. Наноразмерный порошок CoFe_2O_4 имеет температуру блокирования около 45 °K, магнитный момент $\sim 0.85\text{--}0.9\mu_B$ при температуре ~ 0 °K, температура Нееля находится в диапазоне от 110 до 250 °K.

Работа выполнена при поддержке гранта Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» Минобрнауки, контракт П848, Р.

Миргород Юрий Александрович
305040, Курск, ул. 50 лет Октября, д.94
Тел.: (4712)580061; Факс: (4712)504800; E-mail: yu_mirgorod@mail.ru

ИКОСАЭДРИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ В КЛАСТЕРАХ ГЦК МЕТАЛЛОВ

М.Д.Старостенков, В.С.Мясниченко

Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул,

Формирование атомистических структур монометаллических Cu, Au, Ag и биметаллических Cu-Au кластеров изучено методом молекулярной динамики с использованием многочастичного tight-binding потенциала. Моделировался процесс кристаллизации кластеров с числом атомов $N = 512, 616, 1024, 1092$. В ходе сверхбыстрого охлаждения ($U = 1 \text{ ps}^{-1}$) от 1000K до 0.1K были найдены наиболее устойчивые конфигурации атомов системы, соответствующие минимуму потенциальной энергии. Проводилась классификация атомов методом анализа ближайших соседей. В том числе, выделялись атомы 1h модификации, имеющие пятичастичную симметрию в расположении соседей первого порядка.

В полученных кластерах меди цепочки атомов с симметрией пятого порядка сходятся ближе к центру кластера, образуя икосаэдрическое ядро из 13 атомов. Также, в месте выхода одной из 1h осей на поверхность, может находиться незавершенное икосаэдрическое ядро. В кластерах золота рассмотренных размеров образование осей симметрии пятого порядка не приводило к формированию икосаэдрической формы наночастицы в целом. Наблюдалось наличие 6 и более цепочек атомов с пятичастичной симметрией, попарно пересекающихся и не сходящихся при этом в одном икосаэдрическом ядре. Кластеры серебра после охлаждения имели декаэдрическую форму, с тремя осями симметрии пятого порядка. Одна цепочка атомов, образующих декаэдрическую ось, была наиболее длинной и проходила через центр кластера.

Для биметаллического кластера $\text{Cu}_{493}\text{Au}_{123}$ с содержанием меди 80% получена структура общей декаэдрической формы с 7 завершенными икосаэдрическими ядрами, из которых 5 расположены на поверхности кластера и образованы атомами обоих сортов, 2 ядра расположены ближе к центру кластера и образованы атомами меди. При уменьшении доли меди количество икосаэдрических ядер и общая симметрия структуры уменьшается.

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н, профессор
656038, Барнаул, пр. Ленина 46, д.6, ауд. 524
Тел.: (3852)29-08-52; E-mail: genphys@mail.ru

**РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ ЭМИССИИ КОМПЛЕКСОВ $Mn(CO)_5Cl$ И $C_5H_5Mn(CO)_3$:
СОПОСТАВЛЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА МЕТОДОМ
ПОЛНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ И ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**

О.А. Норанович, В.Г. Власенко, А.А. Новакович

НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

Методами теории функционала плотности и полного многократного рассеяния рассчитаны и сопоставлены с экспериментом рентгеновские спектры эмиссии комплексов $Mn(CO)_5Cl$ и $C_5H_5Mn(CO)_3$. Показано, что метод полного многократного рассеяния, использующий приближение «протяженного континуума» и единый полуэмпирический muffin-tin потенциал, позволяет получить в хорошем согласии с экспериментом рентгеновские эмиссионные $SK\alpha$, $OK\alpha$, $MnL\alpha$ и $MnK\beta_5$ -спектры комплексов $Mn(CO)_5Cl$ и $C_5H_5Mn(CO)_3$. Обнаружено, что полученные при расчете этим методом связанные состояния выше muffin-tin нуля потенциала являются резонансными состояниями, которым отвечают полюса функции Грина в нижней полуплоскости комплексной плоскости энергии. Развитый метод численного определения параметров полюсов позволил выделить группу полюсов, близких к вещественной оси, число которых в точности равно числу молекулярных орбиталей, порожденных хорошо атомизированными атомными орбиталями. Эти полюса полностью определяют тонкую структуру эмиссионных $SK\alpha$, $OK\alpha$, $MnL\alpha$ и $MnK\beta_5$ -спектров исследованных комплексов и их энергии близки к энергиям молекулярных орбиталей, найденных методом теории функционала плотности.

Норанович Ольга Александровна, младший научный сотрудник
344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, д. 194
Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: v_vlasenko@rambler.ru

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛАХ, ПОДВЕРГНУТЫХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ

А.В. Олейнич – Лысюк, Н.Д. Раранский

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Черновцы, Украина

В настоящем исследовании приведены результаты изучения поведения упругих и неупругих характеристик материалов с различным типом химической связи (металлической, ковалентной), подвергнутых тепловому, механическому, радиационному и комбинированному (радиационно-тепловому, радиационно-механическому) воздействию, с целью установления общих закономерностей поведения конденсированных систем во внешних силовых полях различной этиологии. Исследовали монокристаллический кремний, выращенный методом Чохральского (Ch-Si), и магнийтермический конденсат бериллия (МТК Ве). Изучали низкочастотное (~1Гц) внутренне трение (ВТ), измеряемое методом обратного крутильного маятника, и эффективный модуль сдвига G_{ef} , измеряемый синхронно с ВТ. Образцы подвергали циклическому механическому воздействию в интервале относительной деформации кручением $\gamma=10^{-6}-10^{-4}$, термоциклированию в интервале 20–400°C, облучению высокоэнергетическими электронами (дозами 1,8 и 3,6 кГрей), а также комбинированному воздействию (облучение электронами + циклическая деформация + термоциклирование) и т.п.

Полученные результаты обсуждаются с единых позиций поведения дефектной структуры в термодинамически нестабильных кристаллах, далеких от термодинамического равновесия, подвергнутых воздействию внешних силовых полей [1]. Показано, что в термодинамически неравновесных системах, независимо от природы процессов, вызвавших неравновесное состояние, поведение упругих и неупругих характеристик во многом идентично: наблюдается инверсия модулей упругости и ВТ, осцилляции на временных зависимостях ВТ и G_{ef} и др.

1. Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Физ. мезомех. **12**, 4, 7 (2009).

Олейнич-Лысюк Алла Васильевна, доцент
58012, Украина, Черновцы, ул. М. Коцюбинского, 2
E-mail: a_oliynich@ukr.net

ЗАВИСИМОСТЬ РЕФРАКЦИИ В РЯДЕ КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА ОТ КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

В.П. Орехова, Т.Ф. Веремейчик

Институт кристаллографии РАН, Москва

Рефракция R характеризует полную поляризуемость моля соединения, влияющую на его оптические и пьезоэлектрические свойства.

Для кристаллов семейства лангасита $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_{14}$ (**LGN**), $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$ (**LGT**), $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (**LGS**), $\text{Sr}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$ (**SGG**), $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$ (**CGG**) рассмотрена зависимость величины рефракции от параметров структуры [1-4] и состава. В том числе показано, что кристаллохимические факторы приводят к пропорциональности величин $R_{\text{эксп}}$ [5], $R_{\text{выч}}$ средним радиусам полиэдров: приблизительно – $r_{\text{cp}}(3e)$ и $r_{\text{cp}}(1a)$, точно – сумме $r_{\text{cp}} = r_{\text{cp}}(3e) + r_{\text{cp}}(1a) + r_{\text{cp}}(3f) + r_{\text{cp}}(2d)$ (табл.), а для La-кристаллов также и к другим корреляциям.

	LGN	LGT	LGS	SGG	CGG
$R_{\text{эксп}}$	88.4	88.4	82.8	77.5	72.9
$r_{\text{cp}}, \text{Å}$	8.274	8.268	8.181	8.138	8.049

Показано, что в отличие от пьезомодуля d_{11} [1] величины $R_{\text{эксп}}$ и

$R_{\text{выч}}$ пропорциональны параметрам эл. ячейки b , c , а не a (рис.), а сама зависимость имеет гладкий характер. Это обусловлено сжатием полиэдров по направлению a (оси C_2). В результате преобладания вклада направлений b , c в величины r_{cp} полиэдров и соотношений – для плотности $\rho \sim 1/b$, $1/c$; для поляризуемости $\alpha - \alpha \sim r_{\text{ион}}^n$ (n зависит от соединения); для рефракции – $R \sim 1/\rho$ и формируется зависимость R от b , c (рис.).

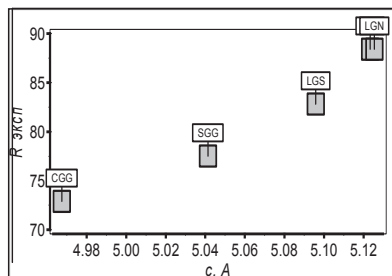


Рис. Зависимость $R_{\text{эксп}}$ от параметра c .

Гладкость полученных зависимостей обусловлена, скорее всего, особенностью [6] катионного состава исследованных кристаллов семейства лангасита.

1. Mill B.V., Pisarevsky Yu.V. // Proc. 2000 IEEE/EIA Intern. Frequency Control Symp., Kansas City, Missouri, USA, P. 133.
2. Дудка А.П., Милль Б.В., Писаревский Ю.В. // Кристаллография. 2009. Т. 54. №4. С. 599.
3. Dudka A. P. // J. Appl. Cryst.. 2010/ V. 43. P. 1440.
4. Дудка А. П., Симонов В.И. // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 6. С. 00.
5. Калдыбаев К.А., Константинова А.Ф., Перекалина З.Б. Гиротропия одноосных поглощающих кристаллов. М.: ИСПИН, 2000. 294 с.
6. Веремейчик Т.Ф., Симонов В.И. // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 6. С. 1037.

Орехова Валентина Петровна, к.ф.-м.н.
119333, Москва, Ленинский просп. д.59
Тел.: 8(499)1351300; Факс: 8(499)1351011; E-mail: vtam@ns.crys.ras.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ $MnSi_{1-x}$ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОЙ ДИФРАКЦИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

Н.М. Потапова¹⁾, В.А. Дядькин¹⁾, Е.В. Москвин¹⁾, С.В. Малеев¹⁾, Д. Мензель²⁾, В.К. Иванов³⁾ Х. Эккерлебе⁴⁾, С.В. Григорьев¹⁾

¹⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, 188300 Гатчина, Россия*

²⁾ *Techinsche Universität Braunschweig, 38106 Braunschweig, Germany*

³⁾ *Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия*

⁴⁾ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, 21502 Geesthacht, Germany*

В работе исследованы монокристаллы и поликристаллические образцы нестехиометрического соединения $MnSi_{1-x}$ с $x = [-0,10 \div 0,10]$, которые были синтезированы методом Чохральского. Анализ спектров порошковой рентгеновской дифракции показал, что все образцы имеют кубическую структуру B20, типичную для чистого стехиометрического $MnSi$, при каком-либо отсутствии дополнительных фаз. Постоянная решетки a этих образцов немного меньше (на 0.004 Å), чем постоянная решётки идеального кристалла $MnSi$ $a = 4.561$ Å.

Данные SQUID- магнитометрии и данные малоуглового рассеяния нейтронов показали, что образцы имеют спиральную магнитную структуру с волновым вектором $k = 0,39$ нм⁻¹, характерную для идеального кристалла $MnSi$, но с критической температурой $T_c = 40$ К, что на 40% выше, чем у идеального кристалла $MnSi$ ($T_c = 29$ К).

Данные малоуглового рассеяния нейтронов также продемонстрировали существование А-фазы на (H-T) фазовой диаграмме. Однако для идеального кристалла $MnSi$ А-фаза существует лишь в узком диапазоне температур (от 28.5 К до $T_c = 29$ К) как для FC (Field Cooled), так и для ZFC (Zero Field Cooled) режимов измерения. Для нестехиометрических образцов диапазон температур для А-фазы также ограничен $T_A = 28.5$ К снизу и $T_c = 40$ К сверху для режима ZFC режима измерений. В то же время для FC режима измерений А-фаза наблюдается вплоть до самых низких температур.

Таким образом, фазовые особенности нестехиометрических дефектных соединений $MnSi_{1-x}$ оказываются очень схожими с особенностями, наблюдаемыми в смешанных соединениях $Fe_{1-x}Co_xSi$.

Потапова Надежда Михайловна
188300, Ленинградская обл., г.Гатчина, Орлова роща
Тел.: +7(81371)46121; E-mail: potapova@Ins.pnpi.spb.ru

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНЫХ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ФОЛЬГАХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ ПОСЛЕ ГИДРИРОВАНИЯ

Ревкевич Г.П., Авдюхина В.М., Акимова О.В., Левин И.С.

Физический факультет МГУ, Москва

Методами прецизионного рентгендифракционного анализа проведено исследование изменения структурных и фазовых характеристик фольг сплавов Pd-Y, Pd-In-Ru и Pd-Ru после насыщения их водородом (в том числе и циклическом), а также в процессе длительной релаксации.

Впервые для фольги сплава Pd-8.8ат.%Y-H при высоком содержании в матрице водорода и вакансий установлен ее распад на сверхструктурную фазу Pd₇Y-H и α -твердый раствор Pd-Y-H. При выходе водорода из матрицы фазы Pd₇Y-H наблюдается фаза Pd₃Y, не содержащая водород, и фаза, обедненная иттрием, в которой содержится около 6 ат.% вакансий.

Для фольг сплава Pd-In-Ru-H обнаружено немонотонное перераспределение атомов индия по глубине образца в процессе релаксации. Длительная релаксация (8200 часов) привела к существенному увеличению разброса концентрации атомов индия в ОКР всех ориентаций с обеих сторон фольги. Средняя концентрация атомов индия в поверхностном слое увеличилась с обеих сторон исследуемой фольги, что свидетельствует о перемещении атомов индия преимущественно из глубины образца к поверхности.

Гидрирование фольги сплава Pd-4,5ат.%Ru приводит к немонотонному изменению ее дефектной структуры в процессе $\beta \rightarrow \alpha$ превращения. Показано, что знаки упругих напряжений в сосуществующих α - и β - фазах различны. Допирование фольги палладия атомами рутения приводит к увеличению концентрации водорода в матрице α -фазы сплава Pd-4,5ат.%Ru и его медленному изменению с увеличением времени релаксации. Обнаружено, что концентрация атомов рутения в поверхностном слое β -фазы увеличивается по мере увеличения времени релаксации образца.

Авдюхина Валентина Михайловна, доцент
119899, Москва ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, д.1, стр.2
Тел.: 7(495)9394610; Факс: 7(495)9394610; E-mail: vmaphys@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ЖЕЛЕЗОМАНГАНЦЕВЫХ КОНКРЕЦИЙ

И.С.Родина¹⁾, А.Н.Кравцова¹⁾, Ю.В.Попов²⁾, А.В.Солдатов¹⁾

¹⁾ НОЦ «Наноразмерная структура вещества», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ ЦКП «Центр исследований минерального сырья и состояния окружающей среды», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Проведено изучение образца железоманганцевых конкреций, взятых с поверхности Срединно-Атлантического хребта (Рифтовая долина, Центральная Атлантика). Элементный состав образца определен по результатам исследований на рентгенофлуоресцентном энергодисперсионном микроанализаторе Oxford INCA Energy 450 XT с детектором INCA X-Act ADD, интегрированным с электронным микроскопом. Химический состав исследуемого образца приведен в Таблице 1. В Таблице 1 представлены усредненные результаты исследования, проведенного по пяти точкам.

Таблица 1. Химический состав образца железоманганцевых конкреций по результатам точечных замеров (в весовых %). Кислород, углерод, вода не определялись.

Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	K	Ca	Ti	Mn	Fe
0,39	1,22	1,69	2,46	0,52	0,21	0,14	0,17	2,85	0,72	17,50	21,13

Зарегистрированы экспериментальные спектры рентгеновского поглощения за K-краями железа и марганца. Измерения выполнены в Курчатовском центре синхротронного излучения и нанотехнологий (г. Москва).

Родина Ирина Сергеевна
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5
Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2975120; E-mail: irodina@inbox.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЕ YBaCo₂O_{5.5} ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ.

А.В. Руткаускас¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, Z. Jirak²⁾, С.Е. Кичанов¹⁾, Е.В. Лукин¹⁾,
Б.Н. Савенко¹⁾

¹⁾Объединённый институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

²⁾Institute of Physics, Cukrovarnicka 10, 162 53 Prague 6, Czech Republic

Сложные оксиды кобальта проявляют множество различных свойств: гигантское магнитосопротивление, переходы диэлектрик – металл, орбитальное и зарядовое упорядочение и т. д.

Соединение YBaCo₂O_{5.5} при нормальных условиях имеет орторомбическую структуру, пространственную группу Rmm. При температуре близкой к комнатной наблюдается фазовый переход из низкоспинового LS в высокоспиновое HS состояние. Однако влияние высокого давления на этот переход не изучено.

В данной работе была исследована кристаллическая и магнитная структура кобальтита YBaCo₂O_{5.5} методом нейтронной дифракции при давлениях до 4.8 GPa и в диапазоне температур от 10 до 300 К. При высоких давлениях обнаружено существенное уменьшение температуры фазового перехода из LS в HS спиновое состояние. Кроме этого при высоком давлении наблюдается изменения магнитного упорядочения ионов кобальта.

Работа поддержана грантом МД-696.2010.2, грантом РФФИ №09-02-00311-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Руткаускас Антон Владимирович, студент
141980, Дубна, Московская область, ул., Жолио Кюри д.6
Тел.: 8-49621-62047; E-mail: anton-rutkauskas@rambler.ru

СПЕКТР МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$

А.В.Рыбина¹⁾, В.В.Ефимов²⁾, П.А.Алексеев^{1,3)}, Е.С.Клементьев^{4,1,3)}, В.Н.Лазуков¹⁾,
В.В.Сиколенко⁵⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²⁾ ОИЯИ, Дубна

³⁾ НИЯУ МИФИ, Москва

⁴⁾ Институт ядерных исследований РАН, Москва

⁵⁾ Deutsches Geoforschungszentrum GFZ, Potsdam, Germany

Магнитный спектральный отклик сложного оксида – кобальтита $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ был исследован методом неупругого рассеяния нейтронов на поликристаллическом образце. Также были измерены спектры неупругого рассеяния нейтронов немагнитного решеточного аналога - $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$. Данные системы в последние годы находятся в фокусе внимания теоретиков и экспериментаторов благодаря необычным электронным, магнитным и решеточным свойствам, фазовым переходам с изменением кристаллической и магнитной структур, электронного и спинового состояния. Эксперимент проводился на врямяпролетном нейтронном спектрометре IN4с (ILL, Grenoble) при падающих энергиях нейтронов 48.4 и 16.9 meV в широком диапазоне углов рассеяния и в температурном диапазоне $10\text{K} < T < 250\text{K}$. В нейтронных спектрах обнаружены магнитные и решеточные возбуждения, в том числе в $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ обнаружены эффекты кристаллического электрического поля (КЭП), связанные с переходами между уровнями основного $4f$ мультиплетта ионов Pr^{3+} , расщепленного в КЭП. На основе нейтронных спектров получены параметры гамильтониана КЭП, что позволяет проводить анализ локальной электронной и кристаллической структур в кобальтитах.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проекты РФФИ 10-02-90027-Бел_а и 11-02-01274-а).

Рыбина Анна Владимировна, м.н.с.

123182, Москва, пл. Курчатова, 1, НИЦ «Курчатовский институт»

Тел.: 8(499)1967662; Факс: 8(499)1965973; E-mail: avrybina@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МАНГАНИТА $R_{0.7}Ba_{0.3}MnO_3$ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Б.Н. Савенко¹⁾, Т.А. Чан¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, А.В. Труханов²⁾, С.Е. Кичанов¹⁾

¹⁾ Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия

²⁾ НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, 220072 г. Минск, Беларусь

Перовскитоподобные манганиты $A_{1-x}A'_xMnO_3$ (A - редкоземельный, A' - щелочноземельный элементы) проявляют большое разнообразие физических свойств в зависимости от типа A, A' – элементов, степени легирования x и внешнего условия. Настоящая работа посвящена исследованию влияния внешнего давления на атомную и магнитную структуру манганита $R_{0.7}Ba_{0.3}MnO_3$ в области низких температур методом нейтронной, рентгеновской дифракции и раманспектрокопии.

Во всем исследуемом интервале давлений 0 – 30.1 ГПа и температур 10 - 300 К атомная структура $R_{0.7}Ba_{0.3}MnO_3$ сохраняет исходную орторомбическую симметрию с пространственной группой *Imma*.

При температуре ниже $T_C=200$ К происходит фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние в $R_{0.7}Ba_{0.3}MnO_3$. При высоком давлении $P=1.9$ ГПа с понижением температуры возникает новая антиферромагнитная фаза А-типа. С увеличением давления наблюдается почти линейное уменьшение T_C и линейное возрастание T_N с величинами $dT_C/dP \approx -2.3$ К/ГПа и $dT_N/dP \approx 2.5$ К/ГПа, соответственно.

Работа поддержана грантом МД-696.2010.2, гранта РФФИ №09-02-00311-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Чан Туан Ань

141980, Московская область, Дубна, ул. Жолио-Кюри 6

Тел.: 8(917)5742036; Факс: 8(49621)65882; E-mail: tuananh060385@yahoo.com

**МАГНИТНЫЕ, НЕЙТРОНО- И РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ В СТРУКТУРЕ НЕМАГНИТНОГО СПЛАВА 40ХНЮ В
ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕРМООБРАБОТКИ**

Р.А. Садыков^{1,2)}, В.С. Литвин¹⁾, А.В. Гулютин²⁾, А.И. Харьковский²⁾,
А.А. Алексеев¹⁾, В.П. Глазков³⁾, С.Н. Аксенов¹⁾, М-С. Appavou⁴⁾, A. I. Ioffe⁴⁾

¹⁾ *Институт ядерных исследований РАН,*

²⁾ *Институт физики высоких давлений РАН,*

³⁾ *Российский Научный Центр - Курчатовский Институт,*

⁴⁾ *Julich Center for Neutron Science, Germany*

Методами дифракции и малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) была исследована наноструктура ряда образцов сплава 40ХНЮ (Ni 58%, Cr39%, Al3%) с различной твердостью. Предварительно образцы тестировались рентгенографическим методом. Немагнитный сплав по твердости не уступает закаленным сталям (до 60HRC) и немагнитен вплоть до 0.1К (магнитная восприимчивость не превышает 0,003 СГСМ/г). Отжиг приводит появлению наночастиц диаметром 20-30 нм, предположительно, Ni₃Al. При отжиге выше 450С происходит образование наночастиц с концентрацией несколько процентов.

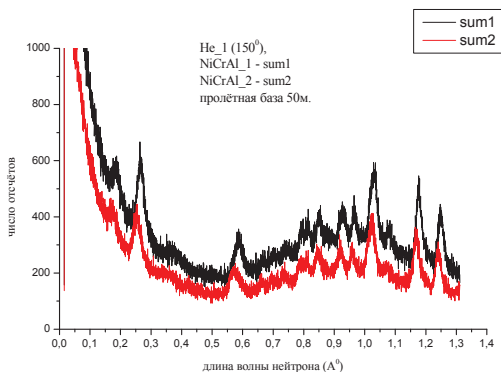


Рис. Нейтронограммы (времяпролетные спектры) сплава с различной твердостью.

Садыков Равиль Асхатович, Зав.Сект. Конденсированных Сред, к.ф.-м.н.
117312, Москва, проспект 60-летия Октября,7а., Институт ядерных исследований РАН
Тел.: (495)3340191; Факс: (495)3340712; E-mail: rsadykov@inr.ru

СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫХ Ca – Si СОДЕРЖАЩИХ МИНЕРАЛОВ

О.В. Сидорова, Л.А. Алешина

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

Целью данной работы были рентгенографические исследования влияния механоактивации на воздухе и в атмосфере CO_2 на структурное состояние псевдоволластонита CaSiO_3 , диопсида $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ и сфена CaTiSiO_5 Ковдорского месторождения.

Образцы измельчались в модифицированном виброистирателе 75Т-ДРМ. Рентгенографирование образцов проводилось на дифрактометре ДРОН-3. Обработка результатов проводилась с использованием пакета программ X-Ray.

Размол псевдоволластонита в течение 30 минут и диопсида в течение 65 часов как в атмосфере CO_2 , так и на воздухе, приводит к тому, что рентгенограммы имеют вид, характерный для аморфного материала со следами отражений от кристаллической составляющей. На рентгенограммах сфена после 30 минут размола на воздухе и в CO_2 , как и в случае размола диопсида в течение 36 часов, сохраняются слабые и размытые отражения от кристаллической фазы.

Механоактивация образцов в зависимости от времени и среды приводит к изменению координационных чисел по сравнению с данными для соответствующих кристаллических порошков. В первую очередь это связано с изменением координации атомов металла. При этом, если число кислородных соседей атома кальция в сфене и диопсиде уменьшается практически на единицу только при размоле в воздухе, то в случае псевдоволластонита это происходит при размоле и в воздухе, и в атмосфере CO_2 . Кроме того, в сфене уменьшается число кислородных соседей атома титана, причём это изменение выражено наиболее ярко в образцах размолотых в CO_2 . В диопсиде число кислородных соседей атома магния также уменьшается, однако наиболее интенсивно этот процесс протекает при размоле в воздухе.

Таким образом, в процессе механоактивации Ca – Si содержащих минералов число кислородных соседей у атомов металла уменьшается. Из трёх исследованных материалов наиболее быстро до рентгеноаморфного состояния размальывается псевдоволластонит, а наиболее медленно – диопсид.

Сидорова Ольга Владимировна
185910, Петрозаводск, пр.Ленина, д.33
Тел.: (8142)719671; Факс: (8142)711000; E-mail: solvak@yandex.ru

ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ И ЗАРЯДОВОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ Fe И Ni В SrTiO₃ ПО ДАННЫМ XAFS–СПЕКТРОСКОПИИ

И.А. Случинская¹⁾, А.И. Лебедев¹⁾, В.Ф. Козловский¹⁾, А. Ерко²⁾

¹⁾ *Московский государственный университет, Москва*

²⁾ *BESSY GmbH, Berlin*

Поиск в кристаллах новых магнитных нецентральных примесей, которые могут одновременно приводить к возникновению сегнетоэлектрического и магнитного упорядочений и магнитоэлектрическому взаимодействию, в настоящее время является актуальной задачей. С этой целью в настоящей работе методами XAFS-спектроскопии исследовано структурное положение и зарядовое состояние примесей Fe и Ni в образцах SrTiO₃, синтезированных в различных условиях.

Образцы с концентрацией примесей 2–3% и различным отклонением от стехиометрии готовились методом твердофазного синтеза при температурах 1100–1500°C. Спектры флуоресцентного EXAFS и XANES записывались на источнике синхротронного излучения BESSY на станции КМС-2 при 300 К на *K*-краях Fe и Ni.

Положение края в спектрах XANES показывает, что зарядовое состояние примесных атомов Fe в SrTiO₃ лежит в пределах 3–4 и практически не зависит от условий синтеза. Спектры EXAFS для образца SrTi_{0.97}Fe_{0.03}O₃, отожженного при 1500°C, полностью соответствуют модели, в которой атомы Fe замещают атомы Ti в узлах ($R_{\text{Fe-O}} = 1.95 \text{ \AA}$). Анализ спектров образца Sr_{0.98}Fe_{0.02}TiO₃, отожженного при 1500°C, показал, что хорошее согласие экспериментальных и расчетных спектров удается получить, если учесть, что наряду с атомами Fe в узлах *B* часть атомов Fe размещается в узлах *A* структуры перовскита ($R_{\text{Fe-O}} \sim 2.9 \text{ \AA}$).

Примесь никеля может быть введена в заметных количествах только в узлы *B* титаната стронция. Спектры XANES и EXAFS образца SrTi_{0.97}Ni_{0.03}O₃, отожженного при 1500°C, показывают, что атомы Ni в SrTiO₃ находятся в зарядовом состоянии +3 и замещают атомы Ti в узлах ($R_{\text{Ni-O}} = 1.93 \text{ \AA}$). При попытке ввести Ni в узлы *A* появлялась вторая фаза NiTiO₃, в которой примесь Ni является двухвалентной, а $R_{\text{Ni-O}} = 2.05 \text{ \AA}$.

Случинская Ирина Александровна, доцент
119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, физический факультет, каф. полупроводников
Тел.: 8(495)9393917; Факс: 8(495)9393731; E-mail: irinasluch@nm.ru

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И СТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРОВ АЛЮМИНИЯ И КОБАЛЬТА В ПРОЦЕССЕ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Д.Н. Соколов, П.В. Комаров, Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, Тверь

В данной работе исследовался фазовый переход твердое тело – жидкость для наночастиц алюминия и кобальта различного размера с использованием метода Монте-Карло. В наших расчётах взаимодействие между атомами задавалось многочастичным потенциалом Гупта [1]:

$$U = \sum_{i=1}^A U_i, \quad U_i = \sum_{j=1, i \neq j}^A \mathcal{G} \exp\left(-P \frac{r_{ij}}{D} - 1\right) - \sqrt{\sum_{j=1, i \neq j}^A \zeta^2 \exp\left(-2 \cdot Q \frac{r_{ij}}{D} - 1\right)} \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между парой атомов с номерами i и j , $\mathcal{G}, P, D, \zeta, Q$ – параметры потенциала [2,3]. В результате компьютерного моделирования нами был выявлен гистерезис процессов плавления и кристаллизации для наночастиц алюминия и кобальта. Кроме того, установлен факт понижения температур плавления и кристаллизации для нанокластеров по сравнению с массивным образцом. Получены калорические зависимости удельной внутренней энергии нанокластеров. При определённой температуре, повышающейся с ростом размера кластера, происходит скачок внутренней энергии соответствующий фазовому переходу твердое тело - жидкость. Кроме того, своеобразным аналогом определения температуры плавления и кристаллизации можно считать подход, в рамках которого вместо скачка (излома) потенциальной части удельной внутренней энергии исследуется пик на температурной зависимости удельной теплоемкости $C_v = (\partial U / \partial T)_v$ [4]. Возрастание теплоемкости происходит в очень узкой температурной области вокруг точки фазового перехода, что позволяет с достаточной точностью определять температуру плавления и кристаллизации кластера. Кроме того для идентификации фазового перехода возможно изучение такой важной структурной характеристики как среднего значения первого координационного числа $\langle Z_1 \rangle$, скачок которого непосредственно связан со скачком удельного объема v . Одной из задач проведенного исследования являлось определение области гистерезиса температур плавления и кристаллизации кластеров. Если для макроскопических систем фазовые переходы (плавление, кристаллизация) происходят при строго определенной одинаковой температуре. Однако, в случае наночастиц переход из твердого состояния в жидкое и наоборот происходит в конечной температурной области ширины $\Delta T = T_m - T_c$.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

1. Gupta R.P. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. № 12. P. 6265.
2. Turner G.W. et al. // J. Chem. Phys. 2000. V. 112. № 10. P. 4773.
3. Zhan L. // Ph.D. thesis. Waterloo, Ontario, Canada, 2005. P. 42.
4. Yu X., Duxbury P.M. // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. №3. P. 2102.

Соколов Денис Николаевич

170100, Тверь, ул. Желябова, 33. Тверской государственный университет

Тел.: (4822)585343 (доб. 106); E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ФЛЮОРИТОПОДОБНОГО СОЕДИНЕНИЯ $Nd_5Mo_3O_{16}$

Н.И.Сорокина¹⁾, О.А.Алексеева¹⁾, И.А.Верин¹⁾, Н.Б.Болотина¹⁾, Е.П.Харитонова²⁾,
В.И.Воронкова²⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

Высокая кислородная проводимость (0.06 См/см при 800°C) соединения состава $La_2Mo_2O_9$ была открыта группой Lacorre [1]. В системе $Nd_2O_3 - MoO_3$ такое соединение отсутствует, но имеется соединение с флюоритоподобной структурой вблизи Nd_2MoO_6 состава $Nd_5Mo_3O_{16}$ [2]. На поликристаллических образцах была исследована его структура [2]. Представляло интерес уточнить кристаллическую структуру $Nd_5Mo_3O_{16}$, проведя исследование на монокристаллах. Монокристаллы $Nd_5Mo_3O_{16}$ были выращены методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве. Поиск элементарной ячейки завершился выбором кубической ячейки с параметром $a=11.028(1)\text{\AA}$, который соотносится с параметром элементарной ячейки флюорита CaF_2 как $a \approx 2a_f$ ($a_f = 5.5 \text{ \AA}$). В ходе расшифровки структуры монокристалла $Nd_5Mo_3O_{16}$ в рамках пр.гр. $Pn-3n$ выявлено смещение атомов Nd1 и Mo со своих положений на осях 4-го порядка с образованием вокруг них четырех позиций с заселенностью 0.25. Атомы Nd2 не вовлечены в процесс разупорядочения, они находятся на оси 3-го порядка (координационный полиэдр $Nd2O_8$ – слегка искаженный куб). Введение в структуру $Nd_5Mo_3O_{16}$ атомов Mo, окруженных четырьмя атомами O2 ($Mo-O2$ 1.695-1.892 \AA) приводит к сильному искажению $Nd1O_8$ -полиэдра и отклонению каркаса структуры от флюоритоподобного. Следствием данного процесса и является выявленное в данной работе ($R=3.6\%$, $R_w=3.27$, $S=1.99$), смещение атомов Nd1 и Mo с осей в рамках пр.гр. $Pn-3n$.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 110300243А.

1. P. Lacorre , F. Goutenoire , O. Bohnke, R. Retoux, Y. Laligant, *Nature*, 2000, 104, 856. [2] P. Hubert, P. Michel, A. Thozet, *Seances Acad. Sci., Ser. C.*, 1973, 275, 1779.

Сорокина Наталия Ивановна, в.н.с.
119333, Москва, Ленинский пр., 59
Тел: (499)1353110; E-mail: nsor@ns.crys.ras.ru

СТРУКТУРНЫЕ, МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НОЧАСТИЦ СУЛЬФИДОВ ЖЕЛЕЗА Fe₃S₄

С.С. Старчиков¹⁾, И.С. Любутин¹⁾, С.-R. Lin²⁾, Ю.В. Коржецкий¹⁾, К.О. Фунтов¹⁾,
Т.В. Дмитриева¹⁾, Ю.Л. Дубинская¹⁾

¹⁾*Институт кристаллографии РАН, Москва 119333, Россия*

²⁾*Institute of Nanotechnology and Department of Mechanical Engineering,
Southern Taiwan University, Tainan County 710, Taiwan*

Соединения объёмных фаз сульфидов железа достаточно хорошо изучены и имеют различные применения от специальных составов для сухого трения и катализаторов до производства солнечных батарей. Наноструктуры сульфидов обладают уникальными физическими свойствами из-за поверхностных или квантово-размерных эффектов, и являются объектом интенсивных исследований. Нанопровода, наностержни и нанокристаллы сульфидов железа рассматриваются как перспективные структурные блоки для магниточувствительных наноустройств, и их магнитные характеристики вызывают особый интерес.

В данной работе наночастицы Fe₃S₄ были синтезированы методом термического разложения ацетата железа (II) и тиомочевины в диэтиленгликоле. Варьируя температуру и время реакции, были синтезированы пять образцов наночастиц различного размера от 9 до 20 нм. Рентгенофазовый анализ показал, что наночастицы обладают кристаллической структурой обращенной шпинели. Зависимость намагниченности от внешнего магнитного поля при 78 и 300 К обнаруживает гистерезис, характерный для ферромагнетиков. С помощью мессбауэровской спектроскопии изучено распределение ионов Fe³⁺ и Fe²⁺ по октаэдрическим и тетраэдрическим узлам шпинельной структуры. Обнаружен электронный обмен между ионами Fe³⁺ и Fe²⁺ в октаэдрах, который сохраняется при низкой температуре. Это указывает на отсутствие перехода Вервея в сульфиде (в отличие от аналогичного оксида Fe₃O₄). Это означает, что с точки зрения транспортных свойств сульфид остаётся при низких температурах материалом с металлической проводимостью.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН № 21П-4 «Нанодиагностика».

Старчиков Сергей Сергеевич

119333, Москва, Ленинский просп., д.59

Тел.: 8(495)3308329; Факс: 8(499)1351011; E-mail: sergey.postbox@gmail.com

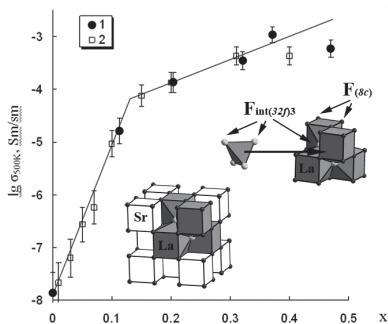
ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА И ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$ ($x = 0.1 - 0.5$)

Е.А. Сутьянова, Д.Н. Каримов, Б.П. Соболев, Н.И. Сорокин

Институт кристаллографии РАН, Москва

Кристаллы $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$ перспективны как оптические материалы для конструкционной оптики УФ- и ИК-диапазонов [1]. Изоморфное введение La^{3+} в SrF_2 увеличивает ионную проводимость (σ) номинально чистого кристалла на 9 порядков (500 К), делая его суперионным проводником [2].

Изучена эволюция дефектного строения кристаллов $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{F}_{2+x}$ ($x = 0.1 - 0.5$) методом рентгеноструктурного анализа и ее связь с процессом ионного транспорта. Кристаллы с x : 0.113; 0.204; 0.321; 0.371; 0.470 получены из расплава методом Бриджмена и не подвергались термической обработке («as grown»). При высоких содержаниях LaF_3 ($x = 0.2 - 0.5$) отношение количества вакансий в основном анионном мотиве к количеству междоузельных фторов $V_F/F_{\text{int}(32\bar{7}3)} \cong 1:4$, что соответствует модели тетраэдрического кластера [3]. При снижении концентрации в кристалле $\text{Sr}_{0.887}\text{La}_{0.113}\text{F}_{2.113}$ отношение $V_F/F_{\text{int}(32\bar{7}3)} \cong 1:12$, что говорит об изменении дефектного строения. Избыток F_{int} находится за пределами кластеров $\{\text{La}_4\text{F}_{26}\}$. По-видимому, эти ионы фтора вызывают первоначальное увеличение σ при введении La^{3+} , однако не приводят к суперионному состоянию. На рис.1 приведена концентрационная зависимость $\lg \sigma$ для 500 К: (1) – для составов из данной работы и (2) для составов, изученных [2]. Кристалл приобретает электрофизические свойства суперионика (энергия активации проводимости ~ 0.6 эВ) при содержаниях LaF_3 выше порога перколяции ($\sim 8 - 12$ мол. %), за которым тетраэдрические кластеры образуют 3D-сетку.



[1] Соболев Б.П., Каримов Д.Н., и др. // Кристаллография. 2009. Т.54. №1. С. 129.

[2] Иванов-Шиц А.К., Сорокин Н.И., и др. // ФТТ. 1983. Т.25. №6, С.1748.

[3] Мурадян Л.А., Максимов Б.А., и др. // Коорд. химия. 1986. Т.12. №10. С. 1398.

Сутьянова Елена Александровна

119333, Москва, Ленинский просп., д. 59

Тел.: 8(495)1353400; Факс: (095)1355210; E-mail: sulyanova@gmail.com

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ФЕНИЛЬНЫМИ И АНИЛИНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ

М.М. Татевосян, Т.Н. Даниленко, В.Г. Власенко, О.В. Швачко
НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

Получены рентгеновские флуоресцентные $\text{SiK}\beta_1$ -спектры кремнийорганических соединений $\text{Si}(\text{C}_6\text{H}_5)_4$, $\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_4$ и $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_2$.

В виду того, что $\text{K}\beta_1$ – спектр кремния обусловлен электронными переходами на предварительно ионизированный уровень 1s-уровень кремния и такие электронные переходы подчинены дипольным правилам отбора, в $\text{SiK}\beta_1$ - спектрах соединений проявляются только те валентные уровни, которые образованы с участием 3p – электронов кремния. Это обстоятельство позволяет определить степень участия атома кремния в химических связях с лигандами по $\text{SiK}\beta_1$ -спектрам, так как интегральные интенсивности компонентов пропорциональны Si 3p– заселенностям МО соединения.

На основе расчётов методом функционала плотности определены электронная структура и состав МО соединений и построены теоретические рентгеновские $\text{SiK}\beta_1$ -спектры. Для квантовохимических расчетов использовалась программа Gaussian-03, гибридный B3LYP функционал и 6-311G** базис.

По результатам квантовохимических расчётов этих молекул определены основные характеристики электронного строения соединений и особенности химических связей атома кремния с атомами ближайшего окружения и лигандами в целом.

Совместный анализ экспериментальных и расчётных характеристик спектров показал, что в $\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_4$ как и в $\text{Si}(\text{C}_6\text{H}_5)_4$ структура энергетических уровней в существенной степени определяется уровнями лигандов фенила и анилина, которые слабо возмущены взаимодействиями с валентными АО кремния.

В $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{Si}(\text{NHC}_6\text{H}_5)_2$ молекулярная структура носит аддитивный характер. Также наблюдаются энергетические сдвиги компонентов $\text{SiK}\beta_1$ -спектров, обусловленные изменением заряда на атоме кремния.

Татевосян Микаэль Мкртычевич, с.н.с.
344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, д.194
Тел.: (863)222-37-58; Факс: (863)243-40-44; E-mail: mmtat@yandex.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ СТРУКТУРЫ ПАЛЛАДИЯ, ТИТАНА И ЦИРКОНИЯ В ПРОЦЕССЕ ИХ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО НАСЫЩЕНИЯ ВОДОРОДОМ

Н.А. Тимченко¹⁾, Р.М. Галимов¹⁾, Н.Н.Коваль²⁾, А.М. Лидер¹⁾, И.П.Чернов¹⁾,
А.Н.Шмаков³⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

²⁾ *Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск*

³⁾ *Институт катализа СО РАН, Новосибирск*

В докладе приводятся результаты исследования динамики кристаллической структуры палладия, титана и циркония в процессе электролитического насыщения водородом, выполненные *in situ* на станции порошковой дифрактометрии накопителя ВЭПП-3 Института ядерной физики СО РАН.

Насыщение водородом образцов титана в 1 молярном растворе H_2SO_4 при плотности тока $0,01 A/m^2$ в течении четырех часов приводит к проявлению на дифрактограммах рефлексов свидетельствующих об образовании в титане водородной подрешетки и возникновении гидридных фаз.

Гидридная фаза в палладии начинает образовываться одновременно с началом процесса электролитического насыщения. В процессе насыщения в образце существуют две фазы, причем количество металлической фазы начинает уменьшаться и через 1,5 часа после начала процесса насыщения металлическая фаза в исследуемом образце перестает идентифицироваться. Исследования динамики выхода водорода из палладия показали его экспоненциальный характер в зависимости от времени при малых дозах радиационного воздействия рентгеновского излучения с энергией 10,5 кэВ. При удалении водорода из образцов путем отжига дифракционные рефлекссы возвращаются в положения, занимаемые до насыщения скачком. При неравновесном, радиационностимулированном, выходе водорода из палладиевых образцов при экспозиционных дозах рентгеновского излучения в несколько сотен Дж/см² также наблюдается возвращение дифракционных рефлекссов в положения, занимаемые до насыщения.

Тимченко Николай Алексеевич, профессор
634050, Томск, пр.Ленина, д. 2а, ФТИ ТПУ
Тел.: (3822)417939; Факс: (3822)423934; E-mail: timchenko@tpu.ru

ФОРМИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УЛЬТРАДИСПЕРСНОГО ПОРОШКА PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃ МЕТОДОМ МЕХАНОАКТИВАЦИИ

Э.Н.Убушаева¹⁾, К.Г.Абдулвахидов²⁾, М.А. Витченко²⁾, И.В. Мардасова²⁾,
Б.К. Абдулвахидов²⁾, Е.В. Лихушина¹⁾

¹⁾Московский Авиационный Институт, Москва

²⁾Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

Среди интенсивно изучаемых активных функциональных материалов, особое место занимают мультиферроики, представителем которых является PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃ (PFN).

Этот материал интересен тем, что он обладает возможностью вариации физических свойств в широком диапазоне без особых технологических ухищрений.

Основным фактором, влияющим на физические свойства керамики PFN, является температурно-временной интервал твердофазной реакции на стадии синтеза.

В данной работе для формирования физических свойств PFN нами успешно применен метод интенсивного силового воздействия в сочетании со сдвиговой деформацией, реализуемый с помощью наковален Бриджмена и позволяющий получать ультрадисперсные порошки (40-500 нм), свойства которых резко отличаются от массивных моно- и поликристаллов PFN.

Обнаружено, что порошки PFN, обработанные после синтеза в наковальнях Бриджмена, обладают классическим размерным эффектом - сильной зависимостью характеристической температуры Дебая, факторов Дебая - Валлера, полных среднеквадратичных смещений от размеров частиц.

Для керамики PFN, спеченной из порошков после механоактивации, имеет место уменьшение температуры максимума диэлектрической проницаемости T_m и рост диэлектрической проницаемости ϵ_m с ростом давлений обработки. На температурных зависимостях удельной электропроводности $\sigma(T)$ обнаружены локальные энергетические уровни, обусловленные примесями, а так же структурными дефектами, генерируемыми в процессе механоактивации.

Убушаева Эльза Николаевна, с.п.
125480, Москва, ул.Вилиса Лациса, д.14, к. 314
Тел.: 8(916)5016606; E-mail: elzza@inbox.ru

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВОВ Fe–Cr И Fe–V

А.Л.Удовский¹⁾, И.С.Смирнов²⁾, И.С.Монахов²⁾, Е.Г.Новоселова²⁾

¹⁾*Институт металлургии и материаловедения им.А.А.Байкова РАН, Москва*

²⁾*Московский государственный институт электроники и математики (ТУ), Москва*

В последние десять лет ОЦК – сплавы системы Fe–Cr стали объектом многочисленных квантово-механических и полуэмпирических расчетов, несмотря на то, что экспериментальная информация как по фазовой диаграмме, так и по термодинамическим свойствам системы Fe–Cr получена достаточно давно. Для вычисления термодинамических свойств сплавов при повышенных температурах необходимы концентрационные зависимости температуры Дебая, параметра кристаллической решетки, модулей упругости, среднего магнитного момента, и температуры Кюри. Исследование выполнено на образцах сплавов железа, легированных хромом и ванадием в интервале концентраций 2-8 ат. %.

Определение параметров решетки сплавов проводилось относительным методом сравнения с эталоном, нанесенным на поверхность исследуемых образцов. В качестве эталона был использован кристалл кремния, параметр решетки которого измерен прецизионным методом Бонда.

Определение температуры Дебая исследуемых сплавов производилось по температурной зависимости интегральной интенсивности рентгеновских дифракционных линий. Для сравнения магнитных свойств образцов твердых растворов систем Fe–Cr и Fe–V проводились измерения удельной намагниченности методом Фарадея. Показано, что магнитный момент атома железа имеет тенденцию к увеличению с ростом концентрации легирующих компонентов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-03-00983-а.

Удовский Александр Львович, г.н.с.
119991, Москва, Ленинский пр., д.49
Тел.: 8(499)1359481; E-mail: AL-UDOVSKY@yandex.ru

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ И РАЗМЕРОВ ЧАСТИЦ НАНОКОМПОЗИТОВ Fe-Al-O НА КАТАЛИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

А.Н.Фалкова¹⁾, А.А.Новакова^{1),3)}, В.В.Лёвина²⁾, И.А.Ильиных²⁾

¹⁾ *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

²⁾ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва*

³⁾ *Институт микро- и нанoeлектроники РАН, Москва*

Как было показано в [1,2], структура и свойства углеродных нанотрубок, полученных методом пиролитического синтеза, напрямую зависят от размера и морфологии наноконпозитов, используемых в качестве катализаторов.

В настоящей работе двумя различными методами были получены наноконпозиты Fe-Al-O, относительная концентрация Fe в которых варьировалась в широком диапазоне от 15 ат % до 90 ат %. Первая методика сочетала в себе механическое смешение гидроксидов α -FeOOH и $Al(OH)_3$ и восстановление полученной смеси в токе водорода при температуре 400 °С. Вторая методика заключалась в получении совместным осаждением гидроксида $Al_xFe_{1-x}(OH)_3$ с дальнейшим восстановлением его в токе водорода при той же температуре.

В работе исследовалось влияние изменения относительных концентраций Fe на размер частиц, морфологию и каталитические свойства финальных наноконпозитов. Пиролитический синтез углеродных нанотрубок проводился в течение 1 часа с использованием пропана при температуре 750 °С. Фазовое состояние и размер частиц наноконпозитов на всех этапах их формирования, а также после пиролитического синтеза исследовались методами Мессбауэровской спектроскопии и просвечивающей электронной микроскопии.

Было показано, что наноконпозиты, полученные методом совместного осаждения с относительной концентрацией Fe в них до 50 ат % обладают ярко выраженными каталитическими свойствами, позволяющими успешно выращивать многостенные углеродные нанотрубки.

1. Ch. Laurent, A. Peigney, E. Flahaut, A. Rousset, *Mater. Research Bulletin* **35**, 661-673 (2000)

2. X.Q.Wang, L.Li, N.J.Chu, Y.P. Liu, H.X. Jin and H.L. Ge, *Mater. Research Bulletin* **44**, 422-425 (2009)

Фалкова Александра Николаевна
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы д.1, строение 2
Тел.: (495)9391226; E-mail: falkova.alexandra@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОХЕЛАТОВ МЕДИ

Ч.Н. Фам¹⁾, В.Г.Власенко¹⁾, А.И.Ураев²⁾, А.С.Бурлов²⁾, Я.В.Зубавичус³⁾
Е.В.Коршунова²⁾

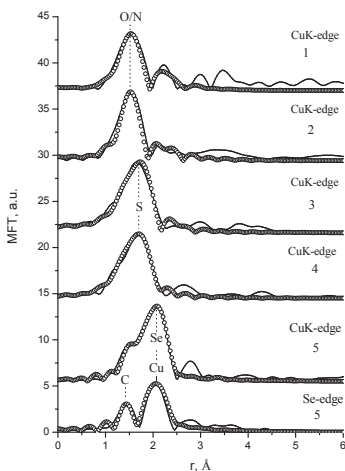
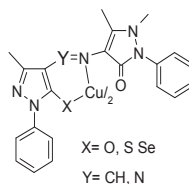
¹⁾ НИИ физики Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

²⁾ НИИ ФОХ Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону

³⁾ КЦСИ и ИТ, РНЦ «Курчатовский институт», Москва

Методом рентгеновской спектроскопии поглощения произведено исследование локальной атомной структуры металлохелатов меди **1-5** (**1**-X=O, Y=N; **2**-X=O, Y=CH; **3**-X=S, Y=N; **4**-X=S, Y=CH; **5**-X=Se, Y=CH).

Рентгеновские Cu и Se K-спектры поглощения получены в режиме пропуска на EXAFS-спектрометре станции «Структурного материаловедения» в Курчатовском синхротронном центре (г. Москва).



МФТ EXAFS CuK- краев всех соединений имеют основной пик, соответствующий проявлению первой КС смешанного состава, положение которого систематически смещается в сторону больших расстояний из-за различия ионных радиусов O, S и Se.

Анализ XANES и EXAFS CuK- краев показал, что в соединениях **2-5** реализуется тетраэдрическое (различной степени искажения) окружение ионов меди. Расстояния и значения фактора Дебая-Валлера типичны для подобного типа комплексов. В комплексе **1**, в отличие от других исследованных

соединений, реализуется сильно искаженное октаэдрическое окружение иона меди за счет дополнительных взаимодействий с атомами кислорода антипиринового фрагмента.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 10-03-00434, 11-03-00475а, МК-170.2011.3.

Фам Нгок Чьяу, магистр

344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, д.194

Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: ngocphancan@mail.ru

СТРУКТУРНЫЕ, МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НОЧАСТИЦ СЕЛЕНИДОВ ЖЕЛЕЗА Fe_3Se_4 И Fe_7Se_8

К.О. Фунтов, И.С. Любутин, С.С. Старчиков, Ю.В. Коржецкий,
К.В. Фролов, Т.В. Дмитриева, Ю.Л. Дубинская

Институт кристаллографии РАН, Москва 119333, Россия

Селениды железа вызывают большой интерес из-за их уникальных электронных, оптических и магнитных свойств. Нанопровода, наностержни, нанокристаллы и нанопластины селенидов железа рассматриваются как возможные перспективные структурные блоки наноструктур, в первую очередь для целей спинтроники. В данной работе наночастицы Fe_3Se_4 и Fe_7Se_8 были синтезированы методом термического разложения исходных компонент в высокотемпературных растворах. Варьируя время температурной обработки, были синтезированы образцы наночастиц с гексагональной (Fe_7Se_8) и моноклинной (Fe_3Se_4) кристаллической структурой, а также два образца содержащих смешанную структуру. Присутствие указанных типов структур в образцах установлено рентгенофазовым анализом. Зависимость намагниченности от внешнего магнитного поля при температурах 5 и 100 К обнаруживает гистерезис, характерный для ферромагнетиков. При 300 К вид кривых намагниченности носит парамагнитный характер и гистерезис не наблюдается. Таким образом, можно ожидать наличие магнитных фазовых переходов в диапазоне температур от 100 до 300 К. Мессбауэровские эксперименты (на ядрах ^{57}Fe) выполнены в интервале температур 90 – 295 К. Во всех образцах при температуре 80 К обнаружено характерное магнитное расщепление мессбауэровских спектров, указывающее на магнитной упорядочение ионов железа в различных структурных позициях. При комнатной температуре спектры всех образцов имеют вид, характерный для парамагнитного состояния ионов железа. Из мессбауэровских спектров получены температурные зависимости параметров сверхтонкого взаимодействия и определены температуры магнитных фазовых переходов ионов. Проанализированы электронные состояния ионов железа в различных структурных позициях.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН № 21П-4 «Нанодиагностика».

Фунтов Константин Олегович

119333, Москва, Ленинский пр-т, д.59

Тел.: 8(495)3308329; Факс: 8(499)1351011; E-mail: funtik-88@bk.ru

СТРУКТУРА СЛОИСТЫХ ХИРАЛЬНЫХ И СПИРАЛЬНЫХ НАНОТРУБОК ПРОИЗВОЛЬНОГО СОСТАВА

З.Я.Халитов, И.К.Насыров, Д.М.Пашин, Д.Н.Валеева

*НИУ «Казанский государственный технический университет
им. А.Н.Туполева»*

Нанотрубки, являющиеся слоистыми кристаллами и зачастую имеющие плоские аналоги, стали одним из наиболее перспективных объектов нанотехнологий. Однако их кристаллографическое описание, первые попытки которого были предприняты еще в 50-х годах прошлого столетия, содержит ряд нерешенных проблем. Описание хиральных углеродных нанотрубок как совокупности винтовых атомных рядов нельзя считать универсальным и пригодным для любых нанотрубок. Определение структуры цилиндрического слоя с помощью целых чисел атомных гексагонов (индексы хиральности) тоже не всегда удобно, так как не все нанотрубки имеют гексагональный мотив структуры. Отсутствует универсальный метод описания структуры спиральных нанотрубок произвольного состава.

В докладе предлагается применение индексов хиральности, выраженных не в углеродных гексагонах, а в ячейках Бравэ, что позволяет использовать их для описания структуры цилиндрических слоистых нанотрубок произвольного химического состава. Получены цилиндрические координаты атомов хиральной и круговой нанотрубок произвольного состава, рассмотрена проблема многослойной хиральной нанотрубки на основе свойственной слоистым кристаллам тенденции к наследованию взаимной ориентации слоев. Получены цилиндрические координаты атомов спиральной (рулонной) нанотрубки произвольного состава в моделях эластичного и жесткого слоя.

Халитов Зуфар Яхьич
420111, Казань, ул.К.Маркса, д.10
Тел.: (843)2384110; Факс: (843)2922141; E-mail: zufar02_53@mail.ru

ФОРМИРОВАНИЕ СФАЛЕРИТОПОДОБНОЙ МОДИФИКАЦИИ ZnO ПРИ ОКИСЛЕНИИ НАНОЧАСТИЦ СПЛАВА PdZn

Е.В.Храмов¹⁾, В.Ю.Мурзин^{2), 3)}, А.А.Велигжанин^{1), 2)}, О.А.Белякова^{2), 4)},
Я.В.Зубавичус^{1), 2), 4)}, А.А.Чернышов²⁾, А.Л. Васильев²⁾

¹⁾ *Московский Физико-Технический Институт*

²⁾ *Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»*

³⁾ *Институт Нефтехимического Синтеза им. А.В. Толчьева РАН*

⁴⁾ *Институт Элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*

В ходе исследования формирования биметаллических Pd-Zn наночастиц из ацетатного палладий-цинкового комплекса при его нагревании в атмосфере $\text{He}+5\%\text{H}_2$ методом рентгеновской дифракции *in situ* был обнаружен необычный эффект. При окислении наночастиц PdZn размером около 15 нм при температуре 500°C наблюдается распад сплава на металлический палладий и две различные полиморфные модификации ZnO. Помимо наиболее распространенной вюрцитоподобной гексагональной (пр. гр. $\text{P6}_3\text{mc}$) модификации оксида цинка, формируется также экзотическая сфалеритоподобная кубическая модификация (пр. гр. F-43m). В определенных условиях окисления можно добиться существенного преобладания сфалеритной модификации. Эта модификация стабильна в нормальных условиях, но при повторной высокотемпературной обработке образца в восстановительной среде происходит полное обратное превращение в сплав PdZn. Обратимость окисления с большой долей вероятности указывает на формирование наночастиц типа ядро-оболочка Pd@ZnO, т.е. активного участия поверхности палладиевых частиц в процессе окисления. Мы считаем, что возможность образования необычной полиморфной модификации ZnO необходимо учитывать при построении моделей активных центров Pd,Zn-катализаторов, широко использующихся, например, для паровой конверсии метанола и восстановительной дегидратации этанола.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий в рамках Госконтракта 16.552.11.7003 при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты 11-03-01020 и 11-03-00820).

Храмов Евгений Владимирович
141197, Московская обл., г. Фрязино, пр. Десантников, д.7
Тел.: 8(916)9006195; E-mail: a9857@yandex.ru

ПЕРВЫЙ ОСТРЫЙ ДИФРАКЦИОННЫЙ МАКСИМУМ В АМОРФНЫХ ТЕЛЛУРИДАХ КРЕМНИЯ

В.З.Цалый

Черновицкий национальный университет, Черновцы, Украина

На дифракционных кривых многих аморфных материалов в малоугловой области часто наблюдается резкий Бреговский рефлекс (в англоязычной литературе: «first sharp diffraction peak» или сокращенно – FSDP). Его положение S_1 на кривых рентгеновской дифракции ($S = 4\pi\sin\Theta/\lambda$, Θ – бреговский угол, λ – длина волны рентгеновского излучения) соответствует $1.0 \div 1.2 \text{ \AA}^{-1}$ для халькогенидных стекол и $\sim 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ для оксидных стекол. Произведение $S_1 \cdot r_1$ равно приблизительно 2.5 для халькогенидных и оксидных стекол, где r_1 – расстояние между наиболее близкими атомами в первой координационной сфере.

Предлагались различные модели для объяснения FSDP. Однако, природа и интерпретация FSDP остаются противоречивыми.

В данном докладе представлены результаты рентгено-дифракционных исследований аморфных сплавов $\text{Si}_x\text{Te}_{100-x}$ ($x=10-25$ ат.%) полученных методом спиннингования расплава.

FSDP на структурных факторах (СФ) наблюдались при $x=20$ и 25 ат.% Si. По полученным СФ рассчитывались функции радиального распределения атомной плотности.

Полученные результаты свидетельствуют что d ($d=2\pi/S_1$) следует принимать как размер структурного элемента, а R_c ($R_c=2\pi/\Delta S_1$) определяет размер областей химической воспроизводимости структуры (или размер асоциата молекулярного типа для химически упорядоченных составов).

Цалый Владимир Зиновьевич, доцент
58013, Украина, Черновцы, ул. Коцюбинского, 2. Черновицкий национальный университет
Тел.: (0372)584866; E-mail: vztsaly@yandex.ru

ПРИРОДА ФЕРРОМАГНЕТИЗМА РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ПРИМЕРЕ НАНОПРОВОДОВ ALN:FE –XANES И XMCD ИССЛЕДОВАНИЯ

Д.С.Чуб, В.Л. Мазалова, А.В. Солдатов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Разбавленные магнитные полупроводники привлекают внимание своим потенциальным применением в спинтронике. Однако в настоящее время механизм возникновения ферромагнетизма и локальная магнитная структура в разбавленных магнитных полупроводниках до конца не ясны. Дихроизм рентгеновских лучей в спектрах поглощения (XMCD) – перспективный метод для изучения локальных магнитных свойств. Детальная информация о спиновом и орбитальном моментах была получена с помощью правила сумм.

В данной работе представлены экспериментальные спектры ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (XANES), снятые за Fe K-краем и Fe L_{2,3}-краем, а также спектры рентгеновского магнитного дихроизма (XMCD) нанопроводов AlN, допированных Fe с содержанием атомов железа около 3,5 ат. %. Геометрическая структура была оптимизирована в рамках DFT теории с помощью программного комплекса ADF-BAND 2010 с использованием различных обменно-корреляционных потенциалов и базисных наборов. Для расчета спектров поглощений исследуемой структуры был использован метод полного многократного рассеяния, реализованный в программном коде FEFF 8.4. XMCD спектры за L_{2,3}-краями железа были получены полнопотенциальным линейаризованным методом присоединенных плоских волн (FLAPW) в программном пакете WIEN2K. На основании теоретических и экспериментальных спектров были сделаны выводы о локальной атомной, электронной и магнитной структурах нанопроводов AlN, допированных Fe.

Чуб Дмитрий Сергеевич
344090, Ростов-на-Дону, Зорге, д.5
Тел.: (950)8529855; E-mail: dmchub@yandex.ru

ДИФРАКЦИЯ МАЛОУГЛОВОГО СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МЕМБРАНАХ АНОДИРОВАННОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

А.П. Чумаков¹⁾, К.С. Напольский²⁾, А.А. Снигирёв³⁾,
И.И. Снигирёва³⁾, А.А. Елисеев²⁾, И.В. Росляков²⁾, С.В. Григорьев¹⁾

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

²⁾*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

³⁾*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Для детального изучения структуры самоупорядоченных пор в мембранах Al_2O_3 , полученных в процессе двустадийного анодирования, были проведены эксперименты по малоугловому дифракции синхротронного излучения. В процессе измерения мембрана устанавливалась перпендикулярно направлению рентгеновского пучка. При этом размер пятна засветки исследуемой области образца менялся контролируемым образом за счет линзы, фокусирующей пучок на позиции детектора. При расположении образца непосредственно после линзы область засветки была максимальна ($\sim 0,5 \times 0,5 \text{ мм}^2$), и получаемая дифракционная картина отражала картину, усреднённую по многим доменам упорядоченного массива пор. Напротив, при приближении образца к детектору размер пучка уменьшался до микронных размеров ($\sim 4 \times 4 \text{ мкм}^2$), что позволило изучить локальную структуры внутри одного домена. Было выявлено, что максимальный размер пучка даёт дифракционную картину с уширенными рефлексамии в азимутальном направлении, что говорит об относительно слабом ориентационном порядке пор. При уменьшении размера пучка ширина рефлексов в азимутальном направлении уменьшается, вследствие локализации засвечиваемой области образца и рассеяния от упорядоченной структуры внутри одного домена. Кроме того, было выявлено сильное ослабление прямого пучка при толщинах мембраны более 10 мкм, что говорит о динамическом характере дифракции на этой наноструктуре.

Чумаков Андрей Петрович, м.н.с.
188300, Гатчина, Ленинградской обл., Орлова роща, ПИЯФ РАН
Тел.: (813)7146121; Факс: (813)7139023; E-mail: chumakov@ins.pnpi.spb.ru

РАЗМЕРНЫЙ ПЕРЕХОД 2D-3D В ИНВЕРТИРОВАННЫХ ОПАЛОПОДОБНЫХ СТРУКТУРАХ

А.В. Чумакова¹⁾, А.А. Мистонов²⁾, Н.А. Григорьева²⁾, К.С. Напольский³⁾,
А. А. Елисеев³⁾, А. Петухов⁴⁾, Д. Белов⁴⁾, W. Bouwman⁵⁾, С.В. Григорьев¹⁾

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

²⁾ *Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт -Петербург*

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

⁴⁾ *Debye Institute, Utrecht University, Utrecht, the Netherlands*

⁵⁾ *Delft Technical University, Delft, the Netherlands*

Перехода от двумерной структуры (2D) к трехмерной структуре (3D) и изменение физических свойств объекта, связанные с этим переходом, в последнее время вызывает особый интерес. Подобные переходы описаны для кластеров, тонких пленок и коллоидных кристаллов. В данной работе продемонстрирована возможность размерного 2D-3D перехода в опалоподобных кристаллах.

Были исследованы пленки инвертированного опалоподобного кристалла на основе кобальта, полученного методом электрокристаллизации металла в порах искусственного опала, методом ультра-малоугловой дифракции синхротронного излучения. Анализ дифракционных картин с последующей реконструкцией обратного пространства показал наличие размерного перехода от двумерного гексагонального плотноупакованного слоя к трехмерной плотноупакованной слоистой структуре. Средняя постоянная решетки в терминах гранецентрированной кубической структуры (ГЦК) составляет $a_0 = 790 \pm 15$ нм, также определено сосуществование двойников с различными последовательностями упаковки слоев в кристалле (АВСАВС...и АСВАСВ...). Установлено, что мозаичность кристалла уменьшается с увеличением числа слоев.

Продемонстрирована принципиальная возможность изучения перехода 2D-3D в инвертированных опалоподобных кристаллах методом ультрамалоугловой дифракции. Выводы, полученные из дифракционных данных, подтверждены сканирующей электронной микроскопией.

Чумакова Александра Владимировна, м.н.с.

188300, Гатчина, Ленинградская обл., Орлова роща, ПИЯФ РАН

Тел.: (813)7146185; Факс: (813)7139023; E-mail: chumakova@lns.pnpi.spb.ru

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА СЛОЖНЫХ Fe –СОДЕРЖАЩИХ ПЕРОВСКИТОВ ПО ДАННЫМ XAFS-СПЕКТРОСКОПИИ

В.А.Шуваева¹⁾, В.Г.Власенко¹⁾, А.А.Чернышов²⁾, Я.В.Зубавичус²⁾ А.А.Велигжанин²⁾

¹⁾ *НИИФизики ЮФУ, Ростов-на-Дону*

²⁾ *КЦСИ «Курчатовский» институт, Москва*

В последнее время возрос интерес к мультиферроикам из-за широких возможностей их практического применения. Сложные оксиды со структурой перовскита, содержащие магнитоактивные ионы, такие как $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ (PFN) активно исследуются в последние годы. Этот материал обладает магнитными свойствами, и в то же время является релаксорным сегнетоэлектриком, и таким образом относится к классу мультиферроиков.

В целях изучения структурных особенностей и их связи со свойствами этого материала нами проведено исследование локального окружения атомов Fe в PFN и двух других сложных перовскитах $\text{BaFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ (BFN) и $\text{PbFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ (PSN) на основе рентгеновских спектров поглощения в области К-края Fe, измеренных на станции Структурного материаловедения Курчатовского синхротронного центра.

Исследование показало, что во всех трех соединениях кислородное окружение атомов Fe характеризуется наличием нескольких координационных сфер, что свидетельствует о смещении атомов Fe из центров кислородных октаэдров. В BFN, который отличается высокосимметричной структурой, наблюдается наименее искаженное кислородное окружение Fe, однако и в этом случае провести уточнение параметров в рамках односферной модели не удалось, что указывает на наличие небольших локальных неупорядоченных структурных искажений. Анализ радиального распределения атомов кислорода вокруг Fe в PFN и PSN показывает, что расстояния Fe-O в этих соединениях лежат в довольно широком интервале, что свидетельствует о низкой симметрии позиции Fe и о возможной разупорядоченности этих атомов.

Шуваева Виктория Анатольевна, с.н.с.
344090, Ростов-на-Дону, Стачки просп., 194, НИИ Физики ЮФУ
Тел.: (863)2223758; Факс: (863)2434044; E-mail: v_shuvaeva@mail.ru

СЕКЦИЯ IV

Информационные и когнитивные
технологии

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

ИНФРАСТРУКТУРА УПРАВЛЕНИЯ НАУЧНЫМИ ДАННЫМИ

Велихов В.Е.

*Федеральное государственное учреждение. Российский научный центр
«Курчатовский институт» РНЦ КИ, Москва*

Современные научные мегаустановки – в материаловедении, нано и био технологиях - показывают экспоненциальный рост темпов генерации и конечных объемов экспериментальных данных благодаря увеличению масштаба установок, внедрению современных сенсоров и детекторов, а также быстрому развитию информационно-коммуникационных технологий. Экспериментальная наука и моделирование (включая имитационное) в настоящее время порождают наборы данных петабайтного масштаба (в процессе моделирования порождаются петабайтные массивы данных, а в комбинации с многократным выполнением задач моделирования они достигают эксабайтных масштабов).

Важнейшей задачей является организация взаимодействия петафлопных вычислительных систем с распределенными эксабайтными источниками данных, а также организация хранения, обмена, обработки и анализа (включая визуализацию) петабайтных потоков данных. Необходимо прорабатывать взаимодействие суперкомпьютеров по высокоскоростным сетям передачи данных с распределенными информационными ресурсами, такими как потоки данных в режиме реального времени, репозитории данных, размещенные в центрах данных, грид сетях и в облачных инфраструктурах. При этом возникают проблемы эффективного и прозрачного доступа к распределенным ресурсам, интеграции разнородных баз данных и хранилищ данных, распределения и репликации сверхбольших массивов данных, полученных в результате экспериментов и моделирования.

Информационно-коммуникационная платформа НИЦ «Курчатовский институт» создается с целью воплощения в жизнь инновационного подхода к научным вычислениям на основе таких концепций, как безопасный удаленный доступ к экспериментальным установкам, распределенная коллективная работа, совместно используемые наборы данных огромного размера и широкомасштабные распределенные вычисления.

Велихов Василий Евгеньевич,
123182, Москва, пл. академика Курчатова, 1 Тел.: (095) 196 91 25, velikhovve@kiae.ru

УЛУЧШЕНИЕ КОНТРОЛЯ АКТИВНОСТИ МОЗГА ЧЕЛОВЕКА БРАГОДАРЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЮ фМРТ-ВИЗУАЛИЗАЦИИ В СОЧЕТАНИИ С ДАННЫМИ О ДВИЖЕНИЯХ ГЛАЗ

Б.М. Величковский¹⁾, Х. Вальтер²⁾, К.Рот³⁾, Т.А. Ахадов⁴⁾, М.В. Алюшин⁵⁾, В.Л. Ушаков⁵⁾ и С.А. Шевчик¹⁾

¹⁾*Курчатовский НБИК-центр, Москва*

²⁾*Клиника Шаритэ, Берлин, Германия*

³⁾*Клиники университета г. Бонн, Германия*

⁴⁾*НИИ неотложной детской хирургии и травматологии, Москва*

⁵⁾*НИЯУ «МИФИ», Москва*

Сочетание функциональной нейровизуализации активности структур головного мозга с анализом параметров движений глаз представляет собой новый метод в когнитивных и когнитивно-аффективных исследованиях. В докладе описаны результаты двух серий fMRI (в магнитном поле 3Т) экспериментов. В первой серии сравнивалась активность мозга испытуемых при рассмотрении коротких фильмов, со сценами эмоционального (прыжок с парашютом) или нейтрального (лекция) содержания. Во второй серии экспериментов функциональная нейровизуализация и регистрация движений глаз проводились одновременно, в режиме on-line. Было установлено, что при возникновении коротких и, соответственно, продолжительных зрительных фиксаций активируются различные области мозга. Если в первом случае, независимо от эмоционального содержания, активируются первичная зрительная кора и, отчасти, теменно-затылочные отделы, то во втором – активированные участки сдвигаются в направлении т.н. «вентрального потока» переработки информации, захватывая наряду с височной корой также нижние (орбитальные) участки лобных долей. Данный подход позволяет значительно более точно, чем до сих пор (см., например, Lindquist et al., in press), определить микроструктуру мозговых процессов, лежащих в основе отдельных эмоциональных состояний человека. Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (госконтракт П1265 от 27.08.2009) и проекта PERCEPT (EU NEST-Pathfinder 043261).

Величковский Борис Митрофанович, профессор
НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.
Тел.: 8(499)1969539; E-mail: velich@applied-cognition.org

РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОТОМОГРАФИЯ НА БАЗЕ ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ НЕЙРОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ МОЗГА

О.И.Ефимова^{1,2)}, Р.А. Сенин¹⁾, А.В. Бузмаков³⁾, В.Е. Асадчиков³⁾, К.В.Анохин^{1,2)}

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», НБИК центр, Москва

²⁾ НИИ нормальной физиологии им. П.К.Анохина РАМН, Москва

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

Для исследования микроструктур мозга и нейрональной пластичности в настоящее время применяются нейростологические методы, недостатком которых является трудоемкость изготовления срезов и последующего восстановления трехмерных структур, а также томография целого мозга, обладающая недостаточным пространственным разрешением. Настоящая работа направлена на разработку технологии неразрушающей визуализации функциональной активности нейронов в мозге при когнитивной нагрузке на базе станции рентгеновской топографии и микротомографии источника синхротронного излучения НБИК центра. Метод основан на избирательном накоплении в деполяризующихся нейронах экзогенных рентгеноконтрастных дивалентных катионов металлов. Неразрушающая рентгеновская микротомография обеспечивает визуализацию отдельных нейронов, активирующихся в ответ на когнитивную задачу, с возможностью трехмерной реконструкции в объеме целого мозга. Реализация разрабатываемого подхода открывает инновационные возможности для диагностики когнитивных состояний и активности структур мозга, исследования нарушений строения и функций нервной системы в моделях нейродегенеративных и психических заболеваний, а также изучения эффектов новых нейротропных соединений.

Ефимова Ольга Игоревна, н.с.
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1
Тел.: 8(499)1966417; E-mail: o.efimova.1@gmail.com

ОБЛАЧНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ВИРТУАЛИЗАЦИИ И УДАЛЕННОГО ДОСТУПА К УНИКАЛЬНЫМ НАУЧНЫМ ПРИБОРАМ

*Жижин М.Н., Колесников И.С., Поляков А.Н., Пойда А.А., Годунов А.С.,
Новиков А.М., Медведев Д.П., Коковин Д.С.*

В Курчатовском институте (КИ) проводятся исследования на уникальных научных приборах, включая синхротрон, роботизированный кристаллизатор макромолекул, и просвечивающий электронный микроскоп сверхвысокого разрешения. Однако доступ к этим приборам для большинства научных учреждений РФ существенно ограничен или вообще закрыт в связи с их территориальной удаленностью от КИ. Чтобы преодолеть эти ограничения, была разработана платформа удаленного доступа к научным приборам, позволяющая «виртуализацию» функций управления научными установками и анализа экспериментальных данных с помощью технологии облачных вычислений.

Программная платформа дает возможность удаленного планирования эксперимента, проведения работ на приборе и дистанционного обучения работы с ним. Платформа позволяет удаленно управлять элементами системы для пользователей различного уровня привилегий с учетом класса решаемых задач – учебные, исследовательские, коммерческие. В архитектуре платформы можно выделить четыре связанных между собой основные компоненты: систему дистанционного обучения, систему подготовки и ведения эксперимента, систему дистанционного управления прибором и симулятор, имитирующий реальную систему директивного управления прибором и анализа данных.

Система дистанционного обучения предназначена для создания, хранения и управления учебными материалами, включая видео-аудио материалы, шаблоны алгоритмов взаимодействия с системой, обучающие виртуальные туры, интерактивное тестирование. Система состоит из трех подсистем: «цифровая библиотека», «контроль знаний» и «организация учебного процесса». Эти подсистемы являются независимыми и могут быть разделены. Применение современных технологий разработки программного обеспечения позволяет интегрировать подсистемы других разработчиков.

В системе подготовки и ведения эксперимента после прохождения авторизации пользователю доступна работа с подсистемами бронирования времени работы на приборе, подсистемой учета образцов и подсистемой анализа результатов эксперимента, включающей в себя библиотеку экспериментальных данных.

Библиотека экспериментальных данных обеспечивает разграничение прав доступа к экспериментальным данным и долговременное хранение данных в различных форматах, например, изображений или многомерных массивов. Вместе с результатами эксперимента в базу данных также заносится: имя пользователя, проводившего эксперимент, программа эксперимента, описание образца, целей, задач эксперимента, параметры работы станции и т.п.

Аппаратная часть платформы состоит из сервера директивного управления прибором, подключенного непосредственно к научному прибору, сервера баз данных пользователей и результатов экспериментов, и сервера удаленного доступа, через который предоставляется доступ ко всем остальным элементам системы. Возможность работы платформы в виде кластера виртуальных машин позволяет размещение в вычислительном облаке. Для размещения систем удаленного доступа к роботизированному кристаллизатору макромолекул, а также к просвечивающему электронному микроскопу, использовалась облачная платформа NanoCloud, созданная в Курчатовском институте в 2011 г. Платформа представляет собой набор облачных сервисов, реализованных на основе открытой облачной инфраструктуры OpenStack.

ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ КАК МЕТОД АНАЛИЗА ВОСПРИЯТИЯ ВИДЕОИНФОРМАЦИИ ПРИ ПОМОЩИ ТЕХНОЛОГИИ РЕГИСТРАЦИИ ДВИЖЕНИЯ ГЛАЗ

Г.Я.Меньшикова²⁾, Р.В.Беляев¹⁾, В.В.Колесов¹⁾, В.И.Рябенков¹⁾

¹⁾ *ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Москва*

²⁾ *МГУ им. М.В. Ломоносова, факультет психологии, Москва*

Основой информационного потока является видеoinформация, проходящая первичную обработку на сетчатке и поступающая в различные структуры мозга для дальнейшей обработки. Исследование этих процессов возможно с помощью различных технологий, одной из которых является- регистрация движения глаз. Она позволяет исследовать когнитивные модели восприятия зрительных стимулов различной сложности, различного объема и изменяющихся во времени с различной скоростью. Анализ траектории движения глаз с применением современных информационных технологий, математических методов статистического, корреляционного и фрактального анализа, а также с помощью компьютерных технологий позволяет определять как общие принципы зрительного восприятия той или иной информации человеком, так и выявлять индивидуальные особенности этого процесса.

В работе ставилась задача определить критерии количественного отличия при восприятии и анализе изображений различной сложности одним наблюдателем, а также анализ одного и того же изображения разными наблюдателями с целью определения индивидуальных особенностей при восприятии видеoinформации. Показано что метод фрактальной размерности, применяемый для характеристики сложных геометрических объектов, при анализе траектории движения глаз, может быть использован для выявления индивидуальных особенностей наблюдателей. Кривая фрактальной размерности трекинга движения глаз, построенная для разных масштабов измерительного окна, отображается в виде сходящейся кривой. При этом разным наблюдателям при заданных параметрах просмотра соответствуют различные наклоны кривой фрактальной размерности. Работа проводилась в рамках проектов РФФИ 09-07-00512 и 11-07-12074.

Меньшикова Галина Яковлевна

125009, Москва, ул. Моховая., д.11, корп.5

Тел.: 8(495)6297554; Факс: 8(495)6295828; E-mail: gmenshikova@gmail.com

**СОЗДАНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО КОМПЛЕКСА НРС2
В НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»**

Е.А. Рябинкин

В данном докладе описывается опыт построения суперкомпьютерного вычислительного комплекса второго поколения НРС2 в Национальном исследовательском центре "Курчатовский институт". Рассмотрены вопросы организации высокопроизводительного хранилища на базе файловой системы Lustre с возможностью удаленного доступа по различным протоколам (GridFTP, SCP, Rsync, BBSP), организации планировки и запуска задач с помощью пакета Slurm и реализация различных пользовательских окружений для широкого класса задач.

Рябинкин Евгений Александрович инженер
123182 г.Москва .Площадь академика Курчатова 1
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
E mail:rea@grid.kiae.ru тел:8(499)1969519

РЕТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕДИ

Г.И. Семушкина¹⁾, Л.Н. Мазалов^{1,2)}, Н.А. Крючкова^{1,2)}, А.В. Окотруб¹⁾,
А.И. Боронин³⁾, Р.В. Гуляев³⁾, Т.В. Басова¹⁾, В.А. Пляшкевич¹⁾

¹⁾ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского
отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия*

²⁾ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

³⁾ *Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской академии наук, Новосибирск, Россия*

Фталоцианиновые комплексы переходных металлов на протяжении многих лет находятся в центре внимания исследователей. Несмотря на то, что они достаточно хорошо изучены (первые работы по металлофталоцианинам относятся к 1930-1940 годам), интерес к этим соединениям не спадает до сих пор. Прежде всего, это обусловлено перспективностью их практического использования в молекулярной электронике. Соответствующие соединения отличаются высокой термической стабильностью, химической инертностью, а также способностью изменять свойства в широком диапазоне значений [1]. Наличие специфических свойств металлофталоцианинов объясняется сильным π - сопряжением электронной системы лиганда и металла.

Физико-химические свойства и электронная структура фталоцианинов существенно зависят от природы донорно-акцепторных характеристик периферийных заместителей. Для выявления влияния заместителей на структуру и свойства фталоцианинов в данной работе было проведено исследование свободных состояний зоны проводимости методом XANES (X-ray absorption near edge structure) замещенных и незамещенных фталоцианинов меди. Для определения природы особенностей, наблюдаемых в спектрах поглощения, проведены квантово-химические расчеты. На основании этих данных и ранее полученной информации [2] о заселенности внутренних и валентных состояний продемонстрирована общая картина электронной структуры исследуемых соединений.

1. Пляшкевич В.А., Басова Т.В. и др. *Поверхность* N 6. С. 3.(2008)

2. Гуляев Р.В., Крючкова Н.А., Мазалов Л. Н., Боронин А.И., Басова Т.В., Пляшкевич В.А. *Поверхность*. № 1. С. 52. (2011)

Семушкина Галина Игоревна

630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д. 3

Тел.: (383)3165341; Факс: (383)3309489; E-mail: spectroscopy@mail.ru

АРХИТЕКТУРА ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ОБРАБОТКИ ГЕНОМНЫХ ДАННЫХ

А. Б. Теслюк

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

В настоящее время все более актуальными становятся исследования, связанные с секвенированием геномов организмов. Эти области исследований подразумевают использование высокопроизводительных платформ секвенирования. Самым значительным научно-технологическим прорывом последних лет стало создание систем анализа ДНК (секвенирования) нового поколения. Секвенаторы нового поколения способны производить массивы геномных данных исчисляемые десятками и сотнями гигабайт. Для эффективной работы с такими объемными данными необходимы мощные вычислительные системы. В данной работе мы приводим описание архитектуры программно-аппаратного комплекса, созданного для решения комплексных задач получения и анализа генетической информации.

Программно-аппаратный комплекс состоит из следующих компонент: а) секвенаторы нового поколения – для получения генетических данных, б) система высокоскоростной передачи данных в систему хранения, в) хранилище данных – которое обеспечивает надежное хранения и доступ к экспериментальным данным, г) параллельный суперкомпьютер для высокопроизводительного анализа данных.

Прототип программно-аппаратного комплекса создан и активно разрабатывается в НИЦ «Курчатовский институт» и уже позволил решить ряд задач по исследованию геномов человека, микробиомов нескольких вымерших организмов а также в области исследования раковых заболеваний.

Теслюк Антон Борисович
123098, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1
Тел.: (903)1315142; E-mail: anthony.teslyuk@grid.kiae.ru

СЕКЦИЯ IV

Информационные и когнитивные
технологии

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ИЗУЧЕНИЕ ПАТОГЕННЫХ ОРГАНОМИНЕРАЛЬНЫХ АГРЕГАТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.С.Коваленко, А.А.Калоян, К.М.Подурец, В.А.Соменков, М.Н.Шушунов

НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

Синхротронное излучение в последние годы стало использоваться для диагностики патогенных новообразований в организмах, как для обнаружения, так и для анализа их типов, необходимого для выбора тактики лечения. В рамках данной работы на Курчатовском источнике синхротронного излучения проведены интроскопические, дифракционные, калориметрические и термогравиметрические эксперименты на образцах желчных и почечных камней различных пациентов. В желчных камнях методом ДТА установлено наличие четырех фазовых переходов при температуре до 150 °С. Данные полностью воспроизводятся на различных камнях одного пациента и несколько отличаются для камней различных пациентов. Показано, что некоторые из этих переходов обратимы, а некоторые нет. Методом рентгеновской дифракции изучены структурные изменения в желчных камнях при изменении температуры, обнаружены структурные изменения при температурах фазовых переходов и плавление при наиболее высокой температуре перехода. Методом фазоконтрастного неразрушающего контроля подтверждена сферолитная структура желчных камней (одно или многоядерная со многими оболочками). Анализ полученных экспериментальных данных поможет выяснить природу фазовых переходов в камнях и их составляющих, часть из которых обнаружена впервые.

Коваленко Екатерина Сергеевна
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.
Тел.: 8(499)1967351; E-mail: kovalenko_es@mail.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИЯХ НАНОСТРУКТУРНОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ЖИВЫХ ТКАНЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ЭЛЕКТРОХИРУРГИЧЕСКОЙ СВАРКИ

С.Е.Подпрятов^{3,4)}, А.А.Вазина^{1,2)}

¹⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *Институт электросварки им. Е.О. Патона НАН Украины, Киев*

⁴⁾ *Киевская городская клиническая больница № 1, Киев*

Электрическая сварка для соединения разрезов живой ткани и органов при хирургических вмешательствах впервые была осуществлена по инициативе академика Б.Е. Патона. Целью начального этапа работы было исследование механизма молекулярной и наноструктурной трансформации биологических тканей под воздействием высокочастотной электрохирургической сварки в различных режимах физиологического диапазона. Исследования проводили методами SAXS/WAXS дифракции с высоким временным разрешением (Дифракционное кино) и рентгеновской флуоресценции.

Воздействие высокочастотной электрохирургической сварки на биологические ткани и биополимерные конструкции проводилось в различных режимах, при этом изменялись частота (несущая, модулирующая), напряжение, сила тока, длительность. Сваривание проводили в ручном и автоматическом режимах. Использовался специально разработанный инструментарий различных размеров и конструкций.

В исследовании использовались образцы биологических тканей от экспериментальных животных (свиньи). В процессе операции под наркозом были получены образцы тканей сердечнососудистой, лимфатической и нервной системы, были отобраны эпителиальные и гладкомышечные ткани желудочно-кишечного тракта, поперечнополосатой скелетной мышцы, в также образцы некоторых органов: трахея, бронхи, легкие, печень, почки, поджелудочная железа. В качестве модельных объектов использованы различные природные биополимеры: волокна коллагена, ткани кератина волоса человека и животных, природные конструкции шелка и др.

В предварительных экспериментальных исследованиях не выявлено существенных различий в картинах рентгеновской дифракции и спектрах рентгеновской флуоресценции контрольных образцов и тканей после воздействия высокочастотной сварки. Однако на образцах кокона, единственной функцией которого является сохранение структурного гомеостаза при резком изменении внешних воздействий (в данном случае - электросварка), была зарегистрирована существенная наноструктурная трансформация.

В качестве маркеров щадящего воздействия электросварки в режимах физиологического диапазона могут быть предложены несколько типов тканей, сохраняющих богатую дифракционную картину, обусловленную высокой упорядоченностью в молекулярной и наноструктурной шкале, например, ткань нерва (миелиновая структура), мышечная ткань, ткани сосудов и многочисленные конструкции биополимеров, такие как коллагеновые волокна, природные конструкции шелка и некоторые другие биосистемы. Работы в развитии.

Работы выполняются при поддержке гранта РФФИ № 11-02-00706.

Подпрятов Сергей Евгеньевич, профессор.

03680, г. Киев, ул. Боженко, д. 11

Тел.: +38 044 205 17 10; Факс: +38 044 205 17 10; E-mail: sepodpryatov@yahoo.com

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ПЛОТНОСТИ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ
СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛОВ $Rb_{1-x}(NH_4)_xI$ В ОБЛАСТИ АЛФА-ФАЗЫ ПРИ 20 К
(НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ)**

Л.С.Смирнов¹⁾, И.Натканец²⁾, Lourdes Mestres³⁾

¹⁾ ФГУП ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия

²⁾ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³⁾ Departament de Química Inorgànica, Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain

Ранее исследование с помощью неупругого некогерентного рассеяния нейтронов (ННРН) при 20 К динамики кристаллов RbI с замещенными ионами рубидия молекулярными ионами аммония показало возникновение двух резонансных мод ионов аммония в области энергии фононных мод и локальных трансляционной оптической ν_5 и либрационной ν_6 мод с энергиями, превышающими максимальную энергию фононных состояний кристалла-хозяина.

Представленный доклад посвящен тонкой структуре плотности фононных состояний $G(E)$ смешанного кристалла $Rb_{1-x}(NH_4)_xI$ при 20 К. Тонкая структура $G(E)$ кристалла-хозяина RbI представлена 5-ью максимумами с энергиями 3.4, 5.5, 6.7, 8.8 и 10.2 мэВ. Эти значения энергий удовлетворительно соответствуют вычисленной $G(E)_{cal}$ на основе измеренных дисперсионных соотношений вдоль $[q,0,0]$, $[q,q,0]$ и $[q,q,q]$ направлений в обратном пространстве кристаллической решетки RbI (Phys Status Solidi, v40(1970)p749).

В смешанных кристаллах для концентраций ионов аммония $x=0.06$ и 0.16 наблюдается появление резонансных мод с энергиями 1.9 и 7.0 мэВ, которые заметно выделяются над $G(E)_0$ кристалла-хозяина в силу преобладающего сечения некогерентного рассеяния нейтронов водорода. С другой стороны, в смешанных кристаллах наблюдаются максимумы в $G(E)$, соответствующие фононным модам кристалла-хозяина, но с участием примесных ионов аммония, как с энергиями 3.2 мэВ в акустической части и 8.8 мэВ в оптической части $G(E)_0$.

Смирнов Лев Самуилович, с.н.с.
117218 Москва, ул.Б.Черемушкинская, д. 25,
Тел.: 8-916-270-86-30; E-mail: lev.smirnov008@rambler.ru

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТРУКТУРА ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Г.С.Юрьев, В.А.Батаев

Новосибирский государственный технический университет

Изучение структуры гибридных наночастиц (НЧ) является проблемой. Необходим дифракционный эксперимент с использованием высокоинтенсивного и монохроматизированного излучения, включая монохроматизацию дифрагированного излучения для контроля некогерентного рассеяния легких атомов. Структурный анализ НЧ как молекулярных образований требует сравнения экспериментальной картины дифракции (e-XRD) с теоретически рассчитанной (t-XRD) согласно теории Дебая, которая связывает картину дифракции с межатомными расстояниями. Картина t-XRD рассчитывается на основе компьютерной 3D модели, например, нанокристаллического алмаза (ND), создаваемой трансляцией известной элементарной ячейки алмаза с координатами атомов в 3D пространстве при необходимом ограничении трансляций по осям координат. Массив координат атомов НЧ представляет собой распределение атомов вокруг центрального атома по координационным сферам (КС) с соответствующим координационным числом (КЧ) атомов в каждой КС. На основании распределения атомов создаются строительные единицы различных НЧ (сферические, цилиндрические с ядрами и оболочками необходимых радиусов и толщины, соответственно). При создании двухфазных гибридных НЧ остова@оболочка решается проблема гетероинтерфейса – определение величины ближайших расстояний между атомами ядра и оболочки. Расстояния в моделях измеряются согласно компьютерной программе визуализации НЧ. В случае отличия межатомных расстояний в интерфейсе от суммы соответствующих известных радиусов атомов выполняется расчет картин t-XRD, которые сравниваются с e-XRD. В интерфейсе связь атомов комплементарная, как в природных соединениях.

Тестом на образование гибридных НЧ служит соответствие t-XRD и e-XRD, в противном случае картины XRD ядра и оболочки аддитивно складываются как независимо дифрагирующие нанофазы. Метод расчета t-XRD как когнитивный обладает предсказательной силой и позволяет по разрешающей способности картины оценить возможность экспериментальной регистрации картин XRD до реального синтеза НЧ. Существование связи между величинами и числом межатомных расстояний с положением и интенсивностью отражений заранее позволяет оценивать их влияние на картины XRD и получать наилучшее соответствие между t-XRD и e-XRD. Даются 3D модели и картины t-XRD.

Юрьев Геннадий Степанович, с.н.с.
630092, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20,
Тел.: 8(383)3460612; E-mail: yurjev@mail.ru

СЕКЦИЯ V

Численные методы, компьютерное
моделирование, теория рассеяния и
дифракции

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

COHERENCE PROPERTIES OF INDIVIDUAL FEMTOSECOND PULSES OF AN X-RAY FREE-ELECTRON LASER

I. A. Vartanyants^{1,2}, A. Singer¹, A. P. Mancuso¹, O. M. Yefanov¹, A. Sakdinawat³, Y. Liu³, E. Bang³, G. J. Williams⁴, G. Cadenazzi⁵, B. Abbey⁵, H. Sinn⁶, D. Attwood³, K. A. Nugent⁵, E. Weckert¹, T. Wang⁴, D. Zhu⁴, B. Wu⁴, C. Graves⁴, A. Scherz⁴, J. J. Turner⁴, W. F. Schlotter⁴, M. Messerschmidt⁴, J. Lüning⁷, Y. Acremann⁸, P. Heimann⁹, D. C. Mancini¹⁰, V. Joshi¹⁰, J. Krzywinski⁴, R. Soufli¹¹, M. Fernandez-Perea¹¹, S. Hau-Riege¹¹, A. G. Peele¹², Y. Feng⁴, O. Krupin^{4,6}, S. Moeller⁴, and W. Wurth¹³

¹*Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Notkestrasse 85, D-22607 Hamburg, Germany*

²*National Research Nuclear University, "MEPhI," 115409 Moscow, Russia*

³*University of California, Berkeley, California 94720, USA*

⁴*SLAC National Accelerator Laboratory, 2575 Sand Hill Road, Menlo Park, California 94025-7015, USA*

⁵*ARC Centre of Excellence for Coherent X-ray Science, School of Physics, The University of Melbourne, Victoria, 3010, Australia*

⁶*European XFEL GmbH, Albert-Einstein-Ring 19, 22761 Hamburg, Germany*

⁷*Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement, UMR 7614 (CNRS), Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*

⁸*ETH Zürich, Laboratorium für Festkörperphysik, Schafmattstrasse 16, 8093 Zürich, Switzerland*

⁹*Advanced Light Source, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California 94720, USA*

¹⁰*Advanced Photon Source and Center for Nanoscale Materials, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA*

¹¹*Lawrence Livermore National Laboratory, 7000 East Avenue, Livermore, California 94550, USA*

¹²*ARC Centre of Excellence for Coherent X-ray Science Department of Physics, La Trobe University, Melbourne, Victoria 3086, Australian Synchrotron, Clayton, 3168 Australia*

¹³*Institut für Experimentalphysik and CFEL, University of Hamburg, Luruper Chaussee 149, 22761 Hamburg, Germany*

Measurements of the spatial and temporal coherence of single, femtosecond x-ray pulses generated by the first hard x-ray free-electron laser, the Linac Coherent Light Source, are presented [1]. Single-shot measurements were performed at 780 eV x-ray photon energy using apertures containing double pinholes in "diffract-and-destroy" mode. We determined a coherence length of 17 μm in the vertical direction, which is approximately the size of the focused Linac Coherent Light Source beam in the same direction. The analysis of the diffraction patterns produced by the pinholes with the largest separation yields an estimate of the temporal coherence time of 0.55 fs. We find that the total degree of transverse coherence is 56% and that the x-ray pulses are adequately described by two transverse coherent modes in each direction. This leads us to the conclusion that 78% of the total power is contained in the dominant mode.

References:

- [1] I. A. Vartanyants, et al., Phys. Rev. Lett., **107**, 144801 (2011)
(see also at: Phys. Rev. Focus issue: <http://focus.aps.org/story/v28/st13>).

**ЭФФЕКТ КОМПТОНА КАК ЭФФЕКТ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ
ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ**

В.В.Аристов

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

В настоящее время для описания рассеяния рентгеновских лучей на электронах используются две теории. Первая – неоклассическая (NCT), применяется для описания рэлеевского (когерентного) рассеяния, основана на «электродинамической» гипотезе Шредингера, рассматривавшего его как рассеяние ЭМ волны на распределенном в атоме заряде – электронной плотности $\rho(r) = e|\Psi(r)|^2$. Комптоновское «некогерентное» рассеяния описывается квантово-динамической теорией (QED), основанной на представлении о точечном электроны и функции $\Psi(r)$, как функции вероятности.

Совмещение двух взаимоисключающих представлений о процессе одного и того же рассеяния лишено логики. Выбор в пользу NCT очевиден. NCT является основой рентгеноструктурного анализа и используется для определения атомных и структурных факторов рассеяния. Квантовая теория эффекта Комптона базируется на ряде постулатов, и не является строгой физической теорией, что существенно ограничивает ее применение. В докладе обсуждается теория аналогичная NCT для комптоновского рассеяния, в которой заряд точечного свободного электрона представляется некоторым распределением электронной плотности. Выдвинута рабочая модель этого распределения: $\rho = \frac{e}{\Lambda_e} \text{sinc}^2\left(\frac{\pi R}{\Lambda_e}\right)$, где $\Lambda_e = \frac{h}{mc}$.

В рамках такой теории, как положение, так и ширина комптоновской линии спектра объясняются дифракцией рентгеновской волны на электронной волне Λ_e . Комптоновское рассеяние в таком представлении является когерентным источником с переменной длиной волны, зависящей от угла наблюдения - аналогом эффектов Черенкова и Парселла-Смита. Теория указывает на возможность получения информации о тонкой структуре атомных и свободных электронов.

Аристов Виталий Васильевич, член-корреспондент РАН
142432, Московская обл, Ногинский р-н, Черноголовка, Институтская ул, д. 6.
Тел.: 8(49652)44276; Факс: 8(495)9628047; E-mail: aristov@ipmt-hpm.ac.ru

РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ И СТРУКТУРА СЕГНЕТОЭЛАСТИКА $K_2Ba(NO_2)_4$

А.Ю.Белов, Л.Ф.Кирпичникова

Институт кристаллографии им А.В.Шубникова РАН, Москва

Особенностью кристаллов нитрита калия бария, $K_2Ba(NO_2)_4$, является существование ориентационного беспорядка у трех различных, кристаллографически неэквивалентных NO_2 групп. Степень их упорядочения связана с диполь-дипольным взаимодействием, зависит от температуры и изменяется в результате фазового перехода типа порядок-беспорядок. На основе теории функционала плотности (ТФП) исследованы особенности структуры сегнетоэластических кристаллов $K_2Ba(NO_2)_4$, обусловленные ориентационным беспорядком в высокотемпературной фазе. Показано, что определенные выше T_c методом рентгеноструктурного анализа положения одной из трех кристаллографически неэквивалентных NO_2 групп не являются равновесными. Расчетом из первых принципов в рамках ТФП найдены равновесные положения атомов и уточнены результаты рентгеноструктурного анализа. Используя нормосохраняющий псевдопотенциал, проведен анализ

электронной структуры, см. рис. 1.

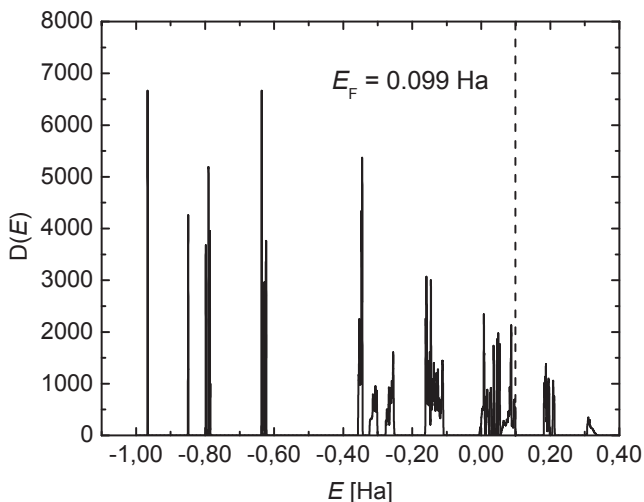


Рис. 1. Плотность состояний валентных электронов в нитрите калия бария

Белов Александр Юрьевич, с.н.с.

119333, Москва, Ленинский проспект, д.59

Тел.: 8(499)1356240; Факс: 8(499)1351011; E-mail: belov@crys.ras.ru

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ И КОРПУСКУЛЯРНЫЕ МОДЫ В КРИСТАЛЛАХ И ИХ ПРОЯВЛЕНИЕ В РЕНТГЕНО И НЕЙТРОНО-ОПТИКЕ

В.А.Беляков

Институт Теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН, Черноголовка

Теоретически исследованы локализованные моды рентгеновского излучения и холодных нейтронов в кристаллах, являющиеся аналогами уже нашедших эффективное применения в РОС лазерах [1] краевых [2] и дефектных [3] оптических мод в фотонных кристаллах. Объектом для наблюдения рентгеновских краевых мод являются совершенные кристаллические слои, дефектных мод - совершенные кристаллы с плоскими дефектами. Рассмотрение задачи проведено в рамках двуволновой динамической теории дифракции. Найдены дисперсионные уравнения для рентгеновских и нейтронных мод и выражения, описывающие пространственное распределения плотности энергии в локализованных модах. В пределе толстых кристаллических слоев найдены аналитические выражения для времени жизни мод (мнимой составляющей их частоты). Показано, что время жизни краевых мод в этом пределе возрастает пропорционально кубу толщины кристаллического слоя, а для дефектных мод время жизни экспоненциально возрастает с толщиной слоев, аналогично случаю оптических локализованных мод [2,3]. Исследовано влияние локализованных мод на спектры отражения и пропускания кристаллов. Показано, что на частотах локализованных мод реализуется эффект аномально сильного поглощения (усиления) в поглощающих (усиливающих) кристаллах. В случае дефектных мод на частоте дефектной моды проявляются узкие частотные линии пропускания излучения кристаллом внутри области дифракционного отражения. Обсуждаются возможности экспериментального наблюдения локализованных рентгеновских мод с помощью синхротронного излучения, а нейтронных мод с помощью ультрахолодных нейтронов [4]. Указывается на перспективы использования локализованных мод для изучения неупругих каналов взаимодействия излучения с кристаллами и высокой монохроматизации рентгеновских и нейтронных пучков.

Работа поддержана грантами РФФИ № 11-02-90419-Укр_ф_а и 10-02-92103-ЯФ_а.

1. V. I.Kopp, Z.-Q. Zhang, and A. Z.Genack, *Prog. Quant. Electron.* **27**(6), 369 (2003).
2. V.A. Belyakov and S.V.Semenov, *JETP*, **109**, 687 (2009).
3. V.A. Belyakov and S.V.Semenov, *JETP*, **112**, 694 (2011).
4. V.A. Belyakov and N.Kaputkina, Труды XIV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника», Нижний Новгород, 2010, т.2. с.327.

Беляков Владимир Алексеевич, профессор
119334, Москва, ул.Косыгина, д.2
Тел.: 8(499)1373244, E-mail: bel@landau.ac.ru

КОГЕРЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИМПУЛЬСОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ ПОСЛЕ ДИФРАКЦИИ В КРИСТАЛЛАХ И МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

В.А.Бушуев¹⁾, Л.Самойлова²⁾

¹⁾ *Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова*

²⁾ *European XFEL GmbH, Notkestr 85, Hamburg 22607, Germany*

Генерация излучения в рентгеновском лазере на свободных электронах (РЛСЭ) основана на явлении самоиндуцированного усиления спонтанного излучения (SASE) сгустков высокоэнергичных электронов при их прохождении через протяженную систему ондулляторов [1]. Излучение РЛСЭ является практически полностью пространственно когерентным и характеризуется весьма посредственной временной когерентностью [1].

На основе развитого в статистической оптике формализма теоретически рассмотрена пространственно-временная трансформация поля случайного импульса РЛСЭ и его статистических свойств при распространении импульса в свободном пространстве и при дифракционном отражении в геометриях Брэгга и Лауэ от одного и от двух параллельно расположенных кристаллов или многослойных структур. Особое внимание уделено зависимости пространственно-временных и статистических характеристик импульса от длины пути, так как расстояния от РЛСЭ до оптических элементов и измерительных станций достаточно велики (~ 500 м). Показано, что дифракционное отражение приводит к значительному увеличению времени когерентности отраженного импульса, а форма функции временной когерентности отраженного импульса сильно отличается от гауссовой формы для падающего импульса и имеет характерный “треугольный” вид с затухающими осцилляциями на краях [2-4]. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-02-00768-а) и BMBF Project 05K10CHG.

1. Geloni, G., Saldin, E., Samoylova, L. et al., *New J. Phys.*, **12**, 035021 (2010).

2. Бушуев, В.А., *Известия РАН. Сер. физ.*, **69**, 1710 (2005).

3. Bushuev, V.A., *J. Synchrotron Rad.*, **15**, 495 (2008).

4. Bushuev, V., Samoylova, L., *Nucl. Instr. and Meth. A.*, **635**, S19 (2011).

АДАПТИВНЫЙ АЛГОРИТМ СГЛАЖИВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ, СОДЕРЖАЩИХ РЕЗКИЕ ПЕРЕПАДЫ ИНТЕНСИВНОСТИ С БОЛЬШИМ ДИНАМИЧЕСКИМ ДИАПАЗОНОМ

В.В. Волков

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Предложен метод сглаживания одномерных кривых методом минимизации суммы суммарного квадратичного отклонения сглаженной кривой от исходной и регуляризованного аналога выражения для кривизны плоской кривой с двумя параметрами регуляризации. Первый параметр определяет общую степень сглаживания, второй параметр придает алгоритму адаптивные свойства и определяет, насколько точно сглаженная кривая передает ход быстро меняющихся участков в исходной кривой. Предложенный алгоритм отличается тем, что на сглаженной кривой значительно ослаблены выбросы по краям узких пиков, обычные для алгоритмов сглаживания, использующих полиномиальные функции и методы частотной фильтрации. Как следствие, лучше сохраняется форма пиков и отсутствует необходимость предварительного сужения диапазона данных для выравнивания степени сглаживания на высоко- и малоинтенсивных участках, что, например, особенно важно для обработки данных дифракции, рефлектометрии, малоуглового рассеяния и т.п. Схема вычислений разработана для неравноотстоящих узлов. Адаптивная фильтрация случайного шума осуществляется путем повторного сглаживания с весами, полученными из последовательности статистических оценок автокорреляции в последовательности остатков после первичного сглаживания с оптимальным параметром регуляризации, который также определяется автоматически по величине критерия автокорреляции остатков. Окончательное сглаживание проводят, вводя дополнительную последовательность весов, рассчитываемых из оценок относительных систематических отклонений остатков. На примере сглаживания данных рентгеновской дифракции и малоуглового рассеяния показана высокая эффективность разработанной схемы, отличающая ее от известных алгоритмов.

Литература

1. Деянов Р.З., Щедрин Б.М., Бузова Е.М. // *Прикладная математика и информатика. Москва, МАКС Пресс. 2008. №30. С.25-33.*
2. Craven P. and Wahba G. // *Numerische Mathematik. 1979. V.31. P.377.*

Волков Владимир Владимирович, вед.научн.сотр.
119333 г. Москва, Ленинский просп., дом 59.
Тел.:(499)1355450, E-mail: volkicras@mail.ru, vvo@ns.crys.ras.ru

ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ КОНЦЕПЦИИ АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ В ЗАДАЧАХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

Ф.С.Джепаров, Д.В.Львов

Институт теоретической и экспериментальной физики, 117259, Москва

В теории малоуглового рассеяния [1] традиционно применяется концепция амплитуды рассеяния, в которой рассеянный поток пропорционален квадрату модуля амплитуды, которая определяется как коэффициент при расходящейся сферической волне. Рассеянная волна ψ_s совпадает со сферической при удалении от мишени с размером a на расстояние $r \gg a^2 / \lambda$, где λ - длина волны излучения, (условие дифракции Фраунгофера). Для тепловых нейтронов с $\lambda = 1 \text{ \AA}$ при $a \approx 1 \text{ мм}$ получается $r \gg R \approx 10^4 \text{ м}$, т.е. условие, которому невозможно удовлетворить в эксперименте. С другой стороны, если неоднородности в образце расположены случайно и имеют размер b , то однократное малоугловое рассеяние происходит независимо на отдельных неоднородностях и работает гораздо более мягкое условие $r \gg b^2 / \lambda$. С теоретической точки зрения [2], использование амплитуды рассеяния ведет к существенному упрощению формул теории многократного малоуглового рассеяния, и в работе [3] было показано, что эта концепция применима к опытам с двухкристальным дифрактометром. В данной работе рассмотрен более общий случай, и рассеянный поток при малоугловом рассеянии проанализирован, исходя из общего выражения для волновой функции $\psi_s = G_0 U \psi$, где G_0 - пропагатор, U - потенциал, а ψ - волновая функция в эйкональном приближении. Получено выражение для потока, родственное тому, что следует из концепции амплитуды рассеяния, но при условиях, которые значительно мягче условия дифракции Фраунгофера.

1. Д.И.Свергун, Л.А.Фейгин. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986.
2. Ф.С.Джепаров, Д.В.Львов. Письма в ЖЭТФ, **72**, 518, 2000.
3. Ф.С.Джепаров, К.С.Забелин, Д.В.Львов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2009, № 9, С. 9.

Джепаров Фридрих Саламонович, зав. лаб., д.ф.-м.н., проф.
117218, Москва, Б. Черемушкинская 25, ГНЦ РФ ИТЭФ
Тел.: 8(499)7896477,8(915)425-51-33; Факс: 8(499)1270833; E-mail: dzheparov@itep.ru

**РЕЗОНАНСНАЯ ДИФРАКЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
КАК МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО–МОРИЯ
В МАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

В.Е. Дмитриенко¹⁾, В.А. Чижиков¹⁾, J. Kokubun²⁾, K. Ishida²⁾, Е.Н. Овчинникова³⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Science University of Tokyo, Japan*

³⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

Сравнительно слабое взаимодействие Дзялошинского–Мория в ряде случаев приводит к качественно новым явлениям в магнитных кристаллах. В частности, оно вызывает небольшой скос магнитных моментов, индуцирующий слабый ферромагнетизм классических антиферромагнетиков типа гематита (Fe_2O_3) или FeVO_3 и многих других. Знак этого взаимодействия обсуждается давно, но надежных методов его измерения не было. Нами показано, что этот знак определяется локальной хиральностью структуры centrosymmetric антиферромагнетиков, и для его измерения должны использоваться методы структурного анализа, т.е. различные виды дифракции [1]. Подробно сравниваются различные методы: дифракция нейтронов, резонансная и магнитная дифракция синхротронного излучения и мёссбуауэровская дифракция. Показано, что интерференция между магнитным и структурным вкладами в «запрещенные» брэгговские отражения позволяет измерить этот знак. Проведено численное моделирование этой интерференции в энергетических спектрах и азимутальной зависимости «запрещенных» отражений от кристаллов Fe_2O_3 , FeVO_3 и La_2CuO_4 с использованием программы FDMNES. Исследованы также особенности взаимодействия Дзялошинского–Мория в кристаллах MnSi.

Работа поддержана Программами фундаментальных исследований Президиума РАН №22П ("Резонансная дифракция рентгеновских лучей и топография запрещенных рефлексов") и "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества", а также грантом РФФИ 10-02-00768.

[1] V.E. Dmitrienko, E.N. Ovchinnikova, J. Kokubun, K. Ishida. Dzyaloshinskii–Moriya interaction: How to measure its sign in weak ferromagnetics? // Письма в ЖЭТФ. 2010. т.92. в. 6, с. 424-428.

ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗМЕРОВ ОБЛАСТЕЙ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЙНИЯ И МИКРОДЕФОРМАЦИЙ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Р. П. Ермаков, В. В. Воронов

Учреждение Российской академии наук Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва

В работе предложен новый алгоритм обработки экспериментальных данных, позволяющий определять размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) (размеры кристаллических блоков) и микродеформаций (вариаций межплоскостных расстояний) с большей надежностью (т.е. избежать систематических ошибок, возникающих из-за применения аппроксимационных методов разделения дублета и вычитания инструментального уширения). Алгоритм включает следующие этапы:

- 1 – разделение $K\alpha$ дублета методом гармонического анализа (метод Гангюле);
- 2 – вычитание инструментального уширения методом Стокса, используя коэффициенты Фурье, полученные в методе Гангюле;
- 3 – разделение вкладов в физическое уширение вызванное размером ОКР и микродеформаций с применением функции Фойгта;
- 4 – расчет линейных размеров ОКР и микродеформаций.

Предложенный алгоритм позволяет проводить расчеты размеров ОКР и микродеформаций по единственному дифракционному профилю, что существенно при измерениях на фазах с низкой кристаллографической симметрией.

С использованием предложенного алгоритма были проведены расчеты размеров ОКР и микродеформаций на образцах прекурсоров фторидов. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными сканирующей электронной микроскопии. Кроме того, данный алгоритм реализован программно под операционную систему Windows, что существенно упрощает его использование.

Ермаков Роман Павлович
119991, Москва, ул.Вавилова, д.38
Тел.: (926)6565056; Факс: (499)1350270; E-mail: x-ray_diffraction@mail.ru

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК $\text{Pr}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0; 1$)

А.К. Иванов-Шиц¹⁾, Г.Н. Мазо²⁾, Ю.А. Мамаев²⁾, М.З. Галин³⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва*

³⁾ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Для прогнозирования функциональных свойств нового класса возможных катодных материалов на основе Pr_2CuO_4 для высокотемпературных твердооксидных топливных элементов нами был использован компьютерный эксперимент. Метод молекулярной динамики позволяет не только изучить структурные и транспортные характеристики моделируемого образцов $\text{Pr}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0; 1$), но также на микроскопическом уровне проследить за поведением различных типов атомов кислорода в структуре и выделить их вклад в общий коэффициент диффузии.

Параметры кристаллической решетки и рассчитанные коэффициенты термического расширения (в области температур 800 -1800 К) хорошо согласуются с прямыми экспериментальными данными.

Анализ поведения корреляционных функций при разных температурах свидетельствует о разупорядоченности кислородной подрешетки, причем диффузия кислорода осуществляется преимущественно атомами типа O_2 в плоскости a - b . Полученные результаты согласуются с рассмотренными ранее механизмами кислород-ионного переноса в сложных купратах.

Коэффициенты диффузии кислорода в интервале 1700—2000 К для слоистых купратов $\text{Pr}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ варьировались в пределах $\sim 10^{-7} - 10^{-6}$ $\text{см}^2/\text{с}$, что позволяет говорить о перспективности использования данной матрицы как электродного материала.

Работа поддержана РФФИ (проект 11-03-00875).

Иванов-Шиц Алексей Кириллович, профессор
119133, Москва, Ленинский пр., 59
E-mail: alexey.k.ivanov@gmail.com

РАСЧЕТ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ ОТ РЕЛАКСИРОВАННЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ МОНТЕ КАРЛО

В.М.Каганер¹⁾, К.К.Сабельфельд²⁾

¹⁾ *Paul Drude Institute for Solid State Electronics, Berlin*

²⁾ *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

Эпитаксиальные пленки релаксируют из-за различия параметров решетки пленки и подложки. На границах раздела образуются дислокации несоответствия, а от границ раздела к поверхности тянутся проникающие дислокации. Рентгеновский анализ релаксированных пленок чаще всего сводится к определению степени релаксации по положению дифракционных пиков. Информация, содержащаяся в ширине и форме пиков, ранее не использовалась в первую очередь потому, что отсутствовали методы расчета рентгеновской дифракции от пленок с дислокационными структурами.

Мы показываем, что такой расчет можно проводить методом Монте Карло. Дислокации генерируются случайным образом, причем произвольные корреляции в их положении естественным образом включаются в модель. Мы учитываем, что дислокации несоответствия стремятся выстроиться периодически, а проникающие дислокации стремятся экранировать друг друга, чтобы уменьшить упругую энергию. При расчете рентгеновского сигнала усреднение по ансамблю коррелированных дислокаций проводится методом Монте Карло. Пространственное интегрирование по объему пленки может также проводиться методом Монте Карло [1], либо по обычным квадратурным формулам [2]. Мы также предлагаем приближенное аналитическое описание рентгеновского рассеяния от коррелированных дислокаций, и проверяем наши приближения прямым монте-карловским расчетом.

1. V.M.Kaganer, O. Brandt, H.Riechert, and K.K. Sabelfeld, Phys. Rev. B **80**, 033306 (2009); V.M.Kaganer and K.K. Sabelfeld, Phys. Rev. B **80**, 184105 (2009).

2. V.M.Kaganer and K.K. Sabelfeld, Acta Cryst. A**66**, 703 (2010); Z. Kristallogr. **225**, 581 (2010).

Dr. Vladimir Kaganer

Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, 10117 Berlin, Germany

Tel.: +49 30 203 77 486; Fax: +49 30 203 77 201; E-mail: kaganer@pdi-berlin.de

ВЛИЯНИЕ ИНСТРУМЕНТАЛЬНОГО УШИРЕНИЯ ДИФРАКЦИОННОЙ ЛИНИИ НА ТОЧНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗМЕРОВ ОБЛАСТЕЙ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ

Е.О. Киле¹⁾, В.В. Корчевский²⁾, А.В. Сюй¹⁾

¹⁾ *Дальневосточный государственный университет путей сообщений, Хабаровск*

²⁾ *Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск*

Размер областей когерентного рассеяния (ОКР) характеризует степень совершенства кристаллической структуры материала. Проблема разделения вкладов физического и инструментального уширений, несмотря на ее давнюю историю, остается актуальной, поскольку развитие дифрактометров (появление новых типов источников рентгеновского излучения, новых оптических компонент, новых детекторов и т.п.) требует совершенствования методов для анализа рентгенодифракционных данных. Одним из таких является численно-аналитический метод, который позволяет оценить влияние инструментальных погрешностей на точность определения ОКР.

Суть метода заключается в использовании вычислительной техники для моделирования процесса получения теоретической дифракционной линии. Данная дифракционная линия описывает экспериментальную, простроенную с учетом инструментальных факторов, по методу наименьших квадратов можно подобрать такие значения углов отражения и такое количество плоскостей отражения, при которых различия между экспериментальной и теоретической линиями будет минимально.

Киле Евгений Олегович, преподаватель
680021, Хабаровск, ул.Серышева, д.47, кафедра «Физика»
Тел.: 8(924)1159831; E-mail: kiler_john@mail.ru

СТРУКТУРА НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Ю.А.Козинкин, В.В.Прядченко, Л.А.Бугаев

Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

На основе прямых расчетов К-спектров поглощения наночастиц кобальта диаметром ~ 3 нм выполнен анализ механизмов формирования краевых особенностей в этих спектрах. Установлено, что наблюдаемые отличия по сравнению со спектрами массивных образцов кобальта обусловлены вкладом поверхностного слоя наночастицы, в котором ближнее окружение атома кобальта существенно отличается от его окружения в объеме наночастицы.

Установлено также, что атомы кобальта в объеме наночастицы имеют структуру ближнего окружения, соответствующую ГЦК структуре массивного образца, доля таких атомов составляет $65 \pm 5\%$.

Козинкин Юрий Александрович, ассистент кафедры
344058, Ростов-на-Дону, ул. Калинина, д.53
Тел.: 8(928)1522372; Факс: (863)2975120; E-mail: Kozinkin_U@mail.ru

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПОЛНОГО ОТРАЖЕНИЯ В ЗАПРЕЩЕННЫЙ РЕФЛЕКС ПРИ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ.

В.Г.Кон¹⁾, А.Ю.Казимиров²⁾

¹⁾ *Национальный исследоват. центр «Курчатовский Институт», Москва*

²⁾ *CHESS, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA*

Представлены результаты теоретического и экспериментального изучения эффекта полного отражения в запрещенные рефлексы 222 и 200 в кристаллах кремния и германия при многоволновой дифракции почти монохроматической плоской волны синхротронного излучения. Эффект был теоретически предсказан в 1988 году [1], однако экспериментальное исследование стало возможным лишь в последние годы.

Известно, что рефлекс 200 является чисто запрещенным, то есть для него коэффициент отражения равен нулю при выполнении условия Брэгга. Однако, вблизи четырехволновой области на шкале азимутального угла дифракционный параметр двухволновой дифракции становится отличным от нуля за счет слабого перераспределения падающей волны в данный рефлекс через другие рефлексы. Динамический характер когерентного рассеяния приводит к тому, что за счет многократного рассеяния возможно полное отражение, если глубина проникновения излучения в кристалл превышает глубину экстинкции. С учетом поглощения это условие выполняется не для всех значений азимутального угла.

Рефлекс 222 не является чисто запрещенным и в данном случае происходит интерференция процессов прямого и непрямого отражения. При определенном значении азимутального угла интерференция носит деструктивный характер и отражение полностью пропадает. Впервые в мире получены экспериментальные результаты, которые с высокой точностью совпадают с теоретическими расчетами. Эффект может быть использован для монохроматизации пучков на новых источниках излучения включая рентгеновский лазер на свободных электронах.

1. В. Г. Кон, Кристаллография, 1988, **33**, N.3, 567-573

Виктор Германович Кон, г.н.с., д.ф.м.н.

123182, Москва, ул. Курчатова, д.1

Тел.: (495)3396723; Факс: (499)1965973; E-mail: kohnvict@yandex.ru

ТРЕХВОЛНОВАЯ ДИФРАКЦИЯ КАК СРЕДСТВО ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ НАРУШЕННЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ

Р.Н.Кютт, М.П.Щеглов

Физико-технический институт им А.Ф.Иоффе

Многоволновая дифракция содержит в себе информацию о структурных искажениях в разных направлениях. Измерение трехволновых пиков по схеме Реннингера позволяет избежать использования комбинаций разных геометрий дифракции [1]. Это имеет особое значение при исследовании эпитаксиальных слоев A^{III} -нитридов, которые характеризуются сильно выраженной анизотропией деформации и дефектной структуры. В настоящей работе исследованы свойства дифракционной картины трехволновой дифракции в сильно нарушенных слоях GaN и других нитридов.

В результате найдены оптимальные способы определения параметров решетки a и c из углового положения трехволновых пиков. Анализ уширений трехволновых рефлексов показал, что пики $\square\square$ сканирования гораздо более чувствительны к степени структурного совершенства (к плотности дислокаций), чем пики $\square\square$ сканирования. Независимо от плотности и типа дислокационной структуры общим является то, что из 10 независимых трехволновых комбинаций наибольшее уширение пиков $\square\square$ моды имеет место для рефлексов $(3\bar{1}\bar{2}0)/(3\bar{1}21)$ и $(3\bar{2}\bar{1}0)/(3\bar{2}11)$ с наибольшей Лауэ-компонентой (параллельной поверхности) вектора обратной решетки вторичного отражения. С другой стороны, самые узкие пики соответствовали комбинациям $(01\bar{1}3)/(0\bar{1}1\bar{2})$ и $(1\bar{1}0\bar{1})/(\bar{1}102)$ с превалирующей брэгговской составляющей векторов обратной решетки. Сравнение дифракционной картины для образцов с разным типом микроструктуры показало, что прямолинейные упорядоченные системы дислокаций вызывают большее уширение $\square\square$ пиков в трехволновой дифракции, чем дислокации при хаотическом распределении.

Анализ интегральной интенсивности J трехволновых рефлексов показал, что отношения J_n/J_5 , где J_5 – интенсивность самого сильного рефлекса $(1\bar{1}00)/(\bar{1}101)$, меняются от образца к образцу даже для толстых слоев и также зависят от типа микроструктуры.

1. Р.Н.Кютт // ЖТФ, т.81, вып 5, с.81 (2011)

Кютт Регинальд Николаевич, профессор
194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26.
Тел.: 8(812)5159238; E-mail: r.kyutt@mail.ioffe.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМЫ МОЛЕКУЛ РЕВМАТОИДНОГО ФАКТОРА ЧЕЛОВЕКА ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

В.А.Лапук¹, В.В.Волков², Э.В.Штыкова², А.И.Торопова³, К.А.Дембо²,
Е.Ю. Варламова⁴, В.П.Тимофеев⁵

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва

²⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва

³⁾ Научно-исследовательский институт ядерной физики
имени Д.В. Скобельцына, Москва

⁴⁾ Гематологический научный центр РАМН, Москва

⁵⁾ Учреждение Российской академии наук Институт молекулярной биологии
им.В.А.Энгельгардта РАН, Москва

Методами малоуглового рентгеновского рассеяния проведено сравнительное исследование морфологии моноклонального иммуноглобулина М (IgM) и двух моноклональных ревматоидных факторов (IgM-RF) от разных доноров. Определение формы молекул проводили по данным рассеяния от растворов с помощью программ моделирования малыми объемными элементами DAMMIN и аминокислотными остатками GASBOR [1]. Полученные данные на новом препарате IgM-RF (Брук) согласуются с результатами для исследованного ранее IgM-RF (Жур) [2]: максимальный размер молекул IgM (38 ± 1 нм) больше, чем в случае обоих IgM-RF ($36,5 \pm 1$ нм) и периферийные области моделей IgM-RF, занятые Fab-фрагментами, показывают наличие в среднем только 5 полноценных фрагментов вместо 10 у IgM. Моделирование молекул IgM-RF блоками из известных кристаллических моделей Fab-фрагментов и теоретической моделью центрального Fc5 пентамера [сc] показало, что удовлетворительное согласие с данными рассеяния можно достичь, если наряду с разупорядочиванием Fab-блоков относительно Fc5, у 5 из Fab-фрагментов отщепить легкую цепь. Вероятно, ревматоидная активность IgM-RF связана с открыванием неспецифичного центра связывания как вследствие большей гибкости полноценных Fab-RF фрагментов [3], так и с отщеплением легких цепей у части из них. Не исключено, что полученные результаты характерны для всех IgM-RF.

Литература

1. *Petoukhov M.V., Konarev P.V., Kikhney A.G., Svergun D.I. // J. Appl. Cryst. 2007. V.40. P.223.*
2. *Volkov V.V., Lapuk V.A., Kayushina R.L., et al. // J. Appl. Crystallogr. 2003, V.36 p.503-508.*
3. *Волков В.В., Лапук В.А., Штыкова Э.В. и др. // Кристаллография. 2008. №3. с.476-484.*

Лапук Виктор Александрович, ст. научный сотрудник
119991 г. Москва, ул. Ленинский просп., дом 47,
Тел.: 89096280491, E-mail: lapuk@ioc.ac.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ КОНТАКТНЫХ КАРТ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕСТРОЕК В БЕЛКАХ ПРИ ИХ ДЕФОРМАЦИИ

И.В. Лихачев, Н.К. Балабаев

Институт математических проблем биологии РАН, г. Пущино

Программами моделирования молекулярной динамики пользуются во многих исследовательских лабораториях. В настоящее время обрабатываются файлы траекторий молекулярной динамики большого объема. Программы TAMD и TAMD.NET (Trajectory analyzer of molecular dynamics – Анализатор траекторий молекулярной динамики) служат для быстрого анализа траектории в целом, предоставляя возможность рассмотрения динамики молекулярной системы в виде молекулярного кино и получения простых характеристик вдоль траектории. Вместе с тем в TAMD заложены и более сложные алгоритмы анализа динамики молекулярных структур. Для больших размеров систем требуются объемные вычисления, которые при использовании стандартных алгоритмов не позволяют интерактивно обрабатывать данные в реальном масштабе времени. Решить эту проблему можно, воспользовавшись графическими процессорами как вычислительными устройствами общего назначения (GPGPU – general purpose graphical processor unit).

Контактная карта представляет собой матрицу парных контактов между атомами молекулярной системы. Обычно такая матрица представляется в виде квадратного симметричного относительно главной диагонали точечного рисунка. Интенсивность закрашки наиболее мелкой видимой единицы изображения – пикселя – связана с появлением или отсутствием контакта между единицами молекулярной системы.

Построение контактной карты больших молекулярных комплексов в динамике подразумевает вычисление матрицы попарных расстояний со скоростью, пригодной для интерактивного показа. Реализовано 3 алгоритма расчета динамических контактных карт: на одном процессоре, на многоядерной системе и на GPU. Время расчета тестовой матрицы большого размера 8300*8300 элементов составило 13 с, 4,7 с, и 0,8 с соответственно.

При помощи нового инструмента проведен анализ изменения пространственной структуры белковой цепи межклеточного белка C-Cadherin под действием сил, приложенных к концам. Исследовалось 3 типа образцов: без ионов, с 12 ионами кальция Ca^{2+} и 12 ионами магния Mg^{2+} . Сделан вывод о влиянии ионов на последовательность разрушения структурных элементов белка.

Использование современных гетерогенных вычислительных систем (многоядерных вычислительных комплексов и графических процессоров) позволяет значительно сократить время вычисления сложных характеристик молекулярных объектов и предоставить интерактивный режим анализа их поведения на траектории молекулярной динамики.

Лихачев Илья Вячеславович
142290, Московская область, г. Пущино, ул. Институтская, 4
Тел.: (4967)318517; Факс: (4967)318517; E-mail: ilya_lihachev@mail.ru

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНСАМБЛЕЙ ДИСКОТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИНА

Лукьянов И.Ю., Соцкий В.В., Быкова В.В., Усольцева Н.В.

Одной из приоритетных задач науки в настоящее время является получение новых функциональных материалов с заданными свойствами. Дискотические производные порфина представляются для этих целей одними из наиболее перспективных материалов.

Проведение лабораторных экспериментов зачастую связано со значительными издержками. Одним из способов решения данной проблемы может служить создание систем математических моделей, которые позволят получить интересующие характеристики соединений.

С целью изучения влияния особенностей молекулярного строения производных порфина на их надмолекулярную организацию (в том числе в присутствии хирального растворителя), в работе была проведена апробация методики решения задач молекулярной динамики на современных графических контроллерах для сложных молекулярных систем большого объема. В качестве объектов исследования были выбраны следующие дискотические соединения-производные порфина: октакарбоксопиразинопорфиразин (соединение I), октакарбоксопиридинопорфиразин (соединение II), октакарбоксофталоцианин (соединение III), 5-(4'-карбоксифенил)-10,15,20-трис(4'-гексадецилоксифенил)порфин (соединение IV), а также их бинарные системы с растворителями (вода и лимонен).

Моделирование показало, что соединения I и II не проявляют мезоморфных свойств. Соединение III также не проявляет термотропного мезоморфизма, однако в бинарной системе с водой образует ассоциаты колончатой формы. Соединение IV демонстрирует наличие термотропного мезоморфизма. Данные компьютерного моделирования хорошо согласуются с результатами выполненного ранее поляризационно-микроскопического исследования, что позволяет его использовать для направленного конструирования новых соединений или систем с заданными свойствами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №10-03-00881-а)

Лукьянов Иван Юрьевич, аспирант
153025, Иваново, ул. Ермака, д. 37
Тел.: (4932)370808; Факс: (4932)324766; E-mail: lukianov.ivan@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОКРАТНОГО МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ПО МЕТОДИКЕ УОРРЕНА

Д.В. Львов, Н.О. Елютин, А.Н. Тюлюсов

Институт теоретической и экспериментальной физики, 117259, Москва

Техника двухкристального спектрометра активно используется в опытах по малоугловому рассеянию нейтронов, когда требуется высокое угловое разрешение. Однако данная методика имеет недостаток – большое время измерения кривой малоуглового рассеяния. В работе [1] для рентгеновского излучения был предложен значительно более быстрый метод определения коэффициента ослабления пучка за счёт малоуглового рассеяния. Данный метод был оптимизирован и применен для малоуглового рассеяния нейтронов [2]. Методика Уоррена реализуется при фиксации кристалла-анализатора в положении, параллельном кристаллу-монокроматору. Измеряются скорость счёта N на детекторе при помещении образца между кристаллами и скорость N' , когда образец находится между анализатором и детектором. Тогда относительная доля нейтронов, не испытавших малоуглового рассеяния при прохождении через образец, равна $T_S = N/N'$. Методика определения величины T_S , предложенная Уорреном, основана на предположении, что рассеянные нейтроны не попадают на детектор. В работе [2] проведен анализ границ применимости метода при однократном малоугловом рассеянии.

В данной работе мы строим теоретическое описание метода Уоррена при произвольной кратности рассеяния. Предложен модифицированный (с учётом рассеянных нейтронов) метод Уоррена для определения концентрации и размера неоднородностей. Показано, что его необходимо использовать при ширине инструментальной линии больше $1/3$ ширины линии МУРН однократного рассеяния, т.к. в этом случае стандартный метод Уоррена даёт большие ошибки.

1. Warren B.E., Journal Applied Phys., 1949, v. 20, p. 96.
2. Н.О. Елютин, Ю.И. Смирнов, Д.В. Львов, А.Н. Тюлюсов, ПТЭ, 2007, No. 4, стр. 5.

Львов Дмитрий Владимирович, ст.н.с., к.ф.-м.н.
117218, Москва, Б. Черемушкинская 25, ГНЦ РФ ИТЭФ
Тел.: 8(499)7896455; Факс: 8(499)1270833; E-mail: lvov@itep.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ
ОРГАНИЗАЦИИ ДИСКОТИЧЕСКИХ МЕЗОГЕНОВ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Д.О. Москвин, В.В. Соцкий, Н.В. Усольцева

НИИ Наноматериалов Ивановского государственного университета, Иваново

В настоящее время мезогены находят широкое применение в различных видах деятельности человека: оптоэлектронике, медицине, дефектоскопии, хроматографии и т. д. Прогнозирование надмолекулярной организации таких соединений позволяет синтезировать новые вещества с заранее заданными свойствами.

Целью данной работы явилась апробация методов молекулярно-динамического моделирования дискотических мезогенов для отработки прогностических подходов к синтезу соединений с заданной надмолекулярной организацией на базе исследованного ранее гептилоксисамещённого трифенилена.

Из литературных данных известно, что в интервале температур от 67°С до 92°С данное соединение проявляет мезогенные свойства, образуя колончатую нематическую фазу.

Наша задача состояла в проведении численного моделирования надмолекулярной организации данного соединения и сопоставлении результатов с ранее полученными экспериментальными данными.

Моделирование проводилось для 4-х значений температур (52°С, 72°С, 87°С, 107°С). Были построены функции радиального распределения молекул, из анализа которых были получены данные о фазовых состояниях системы. Фазовые состояния совпали с установленными ранее экспериментально.

Работа поддержана грантами РФФИ 10-03-00881 и ФЦП 16.740.11.0206.

Москвин Дмитрий Олегович
153025, Иваново, ул. Ермака, д. 39
Тел.: (4932)370808; Факс: (4932)324766; E-mail: Moskvin1987@mail.ru

**АНАЛИЗ ОДНОЭЛЕКТРОННЫХ И МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ЭФФЕКТОВ В
ФОРМИРОВАНИИ $L_{2,3}$ - СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ОКСИДОВ ТИТАНА В РАМКАХ
МЕТОДА МНОГОКАНАЛЬНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ**

А.А. Новакович¹⁾, А.И. Таранухина¹⁾, Р.В. Ведринский¹⁾, В.Л. Крайзман²⁾

¹⁾ *НИИ физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

²⁾ *University of Maryland, College Park, USA*

Рентгеновские $L_{2,3}$ - спектры поглощения ионов титана в оксидах SrTiO₃ и TiO₂ (рутил и анатаз), важных в практическом отношении и детально исследованных экспериментально, многие годы являются предметом дискуссий. Отличие спектров этих соединений в области L_3 - e_g -пика связывается либо с мультиплетными эффектами электрон-дырочного взаимодействия в кристаллическом поле лигандов [1], либо с одноэлектронными эффектами многократного рассеяния в многоцентровом потенциале различной симметрии [2]. С целью выявления механизма формирования тонкой структуры спектров изучаемых соединений $L_{2,3}$ - спектры титана рассчитаны в различных подходах: 1) методом полного многократного рассеяния, реализованным Новаковичем А.А. в программном комплексе XKDQ [3]; 2) в многоканальной версии метода полного многократного рассеяния, недавно разработанной нами вместе с программным кодом MCGFXL [4]. Спектры, полученные с использованием нового метода, позволяющего в едином подходе учитывать как мультиплетные эффекты, так и одноэлектронные эффекты многократного рассеяния фотоэлектрона, хорошо согласуются с экспериментом. Показано, что расщепление L_3 - e_g -пика обусловлено особенностями формирования одноэлектронных свободных состояний в рутиле с рентгеновской дыркой, локализованной на ионе Ti.

1. F.M.F. De Groot, J.C. Fuggle, B.T. Thole, and G.A. Sawatzky, Phys.Rev. B **41**, 928 (1990).

2. P. Krüger, Phys.Rev. B **81**, 125121-1 (2010).

3. V. Krayzman, I. Maznichenko, A. Novakovich, and R. Vedrinskii, in Proceedings of the 13th International Conference on X-Ray Absorption Fine Structure, Stanford, California, 2006, Vol. 882, p. 431.

4. А.И. Таранухина, А.А. Новакович, Р.В. Ведринский, тезисы доклада, представленные на конференцию «РСНЭ-НБИК 2011».

АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ СОСТАВА Pt-Ag ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

В.В. Прядченко¹⁾, Е.Б. Пахомова²⁾, К.В. Гамаюнова¹⁾, Я.В. Зубавичус³⁾,
А.А. Велигжанин³⁾, В.Е. Гутерман²⁾, Л.А. Бугаев¹⁾

¹⁾ *Физический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

²⁾ *Химический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

³⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва*

Атомное строение и степень реализации архитектуры “ядро (из атомов Ag) – оболочка (из атомов Pt)” в нанесенных на углеродный носитель наночастицах состава Pt-Ag, полученных на основе разработанных методик жидкофазного синтеза, определяются с помощью К-спектров рентгеновского поглощения серебра (Ag K-XAS) и L₃ спектров поглощения платины (Pt L₃-XAS). Экспериментальные Ag K-XAS и Pt L₃-XAS спектры синтезированных наночастиц, до и после коррозионной обработки их поверхности, измерены в Центре СИ Курчатовского института. Для количественного определения параметров структуры ближнего окружения атомов Ag и Pt в изучаемых двухкомпонентных наночастицах используется специально разработанная методика многопараметрической оптимизации Фурье-образов экспериментальных спектров, позволяющая преодолевать сильные корреляции между рядом варьируемых параметров и, как следствие, позволяющая избежать неустойчивостей в получаемых значениях параметров, определяющих структуру многокомпонентных наночастиц. Совокупность данных об атомном строении изучаемых наночастиц (включая данные о наличии оболочки и ядра, существенно различающихся по атомному составу и структуре, процентное содержание атомов в ядре и в оболочке), полученных с помощью используемого подхода, позволила установить зависимость между условиями синтеза, с одной стороны, и атомным строением двухкомпонентных наночастиц Pt-Ag/C с другой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11-03-00820).

Прядченко Василий Владимирович, аспирант
346720, Аксай, ул.Садовая, д.18, кв.33
Тел.: 8(908)1737521; Факс: 8(863)2795120; E-mail: vasilii.pryadchenko@gmail.com

ОСОБЕННОСТИ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ РЕШЕТКАХ

В.И. Пунегов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

Разработана теория и проведено численное моделирование рассеяния рентгеновских лучей на различных поверхностных решетках. Рассмотрены модели динамической (ультразвуковой), многослойной и фазовой решетки.

Показано, что для модели динамической решетки структура углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве для соответствующих дифракционных порядков зависит от амплитуды поверхностной акустической волны. В случае многослойной дифракционной решетки исследовано влияние формы штриха на контуры равной интенсивности рассеянного рентгеновского излучения. Численным моделированием исследовано рассеяние рентгеновских лучей на решетке в случае ближнего и дальнего порядка рельефной структуры. Выполнено детальное рассмотрение рассеяния рентгеновских лучей на фазовой кристаллической решетке. Показано, что появление дополнительных дифракционных порядков связано с особенностями формирования рентгеновских полей в объеме кристалла. Интенсивности дифракционных порядков находятся в полном соответствии с коэффициентами пропускания периодически расположенных на поверхности кристалла металлических полос.

Для всех моделей поверхностных решеток проведено численное моделирование карт распределения интенсивностей рассеяния в обратном пространстве. Приводится сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00445-а) и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН - РЦП-2011 (проект П1)

Пунегов Василий Ильич, профессор
167982, г. Сыктывкар, ул. Коммунистическая д.24
Тел.(8212)222716; Факс: (8212)215740; E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

ДИНАМИЧЕСКОЕ И КИНЕМАТИЧЕСКОЕ РАССЕЙНИЕ НЕЙТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ КОЛЕБЛЮЩИМИСЯ КРИСТАЛЛАМИ

Э.А.Райтман¹⁾, В.Н. Гаврилов¹⁾, Д.Э. Мясичев¹⁾, Ю.В. Никитенко²⁾

¹⁾ ФЭИ АН Латвии, Рига, Латвия

²⁾ ОИЯИ, Дубна, Россия

Изучалось упругое и неупругое рассеяние нейтронов ультразвуковыми волнами в совершенных и деформированных (изогнутых) монокристаллах, мозаичных кристаллах, аморфном кварце и стекле, а также в слоистых наноструктурах. В зависимости от конкретной задачи использовались различные методы исследования.

Дифракция. Высокочастотные объемные ультразвуковые волны (УЗВ) (10-100МГц) в монокристаллах приводят к модификации дисперсионных поверхностей в случае дифракции рентгеновских лучей и нейтронов. В совершенных кристаллах это вызывает значительный *рост* интенсивности дифрагированного пучка. В слабо деформированном кристалле наблюдается резкий *спад* интенсивности (до 50-80%) при малых амплитудах УЗВ. Исследовались осцилляционные зависимости интенсивности дифракции в зависимости от амплитуды УЗВ для совершенного кристалла, что позволяет определять амплитуду УЗВ и распределение звукового поля, или осцилляции интенсивности в зависимости от градиента деформации, что дает возможность определения величины деформаций и их распределения по кристаллу.

Рефлектометрия. Исследовалось полное и брэгговское отражение нейтронов в зависимости от амплитуды и частоты УЗВ при высоком уровне возбуждения. Измерения проводились на установках СПН-1 (ОИЯИ, Дубна) и V-6 (ИХМ, Берлин). Наблюдалось не зеркальное отражение нейтронов, объясненное рассеянием ансамбля классических частиц на колеблющемся потенциальном барьере. Оценена вероятность неупругого рассеяния нейтронов в многослойных наноструктурах при их ультразвуковом возбуждении.

Райтман Эрнст Аронович, профессор

LV-1009, Ул.Матиса 43-2,

Тел.: (371)67558678; Факс: (371)67558389; E-mail: eraitmans@apollo.lv

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СМЕШАННЫХ АU-CO НАНОКОНТАКТОВ

Е.М.Смелова, К.М.Цысарь, Д.И.Бажанов, А.М.Салецкий, А.Л.Клавсюк

Физический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва

В работе было проведено первопринципное исследование свойств атомной структуры и геометрии смешанных Au-Co наноконтактов с помощью программы VASP, итерационно решающей самосогласованную систему уравнений Кона-Шэма

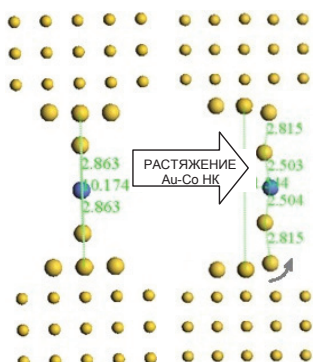


Рис.1. Вытягивание атома Au из поверхности электрода и удлинение цепи смешанного Au-Co наноконтакта для конфигурации с одним атомом Co в цепи НК (AuCoAu).

в базисе плоских [1]. В работе рассмотрены две возможные конфигурации смешанного Au-Co наноконтакта: (1) AuCoAu – с одним атомом кобальта в цепи наноконтакта и (2) AuCoCo – с двумя атомами кобальта в цепи НК, которая моделирует возможность агрегации атомов Co в цепи наноконтакта. Расчёты показали, что формирование Au-Co наноконтактов энергетически более выгодно, чем идеальных золотых НК. Энергия связи атомов в цепи Au-Co НК выше, чем в идеальном золотом НК. Однако, разрыв смешанного НК в конфигурации AuCoCo происходит значительно раньше, чем идеального золотого НК, уже при расстояниях между электродами $\sim 9.04\text{Å}$, что объясняется

неоднородным распределением электронной плотности в цепи наноконтакта. В конфигурации AuCoAu при растяжении наноконтакта в работе было обнаружено удлинение цепи наноконтакта и образование стабильного смешанного 5-ти атомного НК, за счет вытягивания атома золота из поверхности электрода при растяжении до расстояний между электродами $>10.56\text{Å}$ (Рис.1).

1. G.Kresse, J.Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, Phys. Rev. B, **54**, 11169 (1996)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В ТОПОГРАФИИ СКАНИРОВАНИЯ

И.А.Смирнова, Э.В.Суворов

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

Методы рентгеновской топографии давно и успешно используются для оценки структурного совершенства как кристаллов, так и многослойных структур. Однако, для большинства экспериментальных ситуаций возможен лишь качественный анализ наблюдаемого изображения дефектов. При этом количественный анализ рентгеновского дифракционного изображения дефектов в кристаллах требует решения системы дифференциальных уравнений Такаги

В работе численным методом решения уравнений Такаги моделируются изображения дефектов в секционной и проекционной топографии. Изображение в топографии сканирования получают суммированием секционных изображений от протяженного источника на входной поверхности кристалла. Протяженный источник, состоит из ряда независимых точечных источников. В работе анализируется оптимальный шаг интегрирования и суммирования. Моделирование дифракционного эксперимента позволяет построить изображения дислокации при произвольной толщине кристалла, длине волны и проследить, как формируется изображение. Моделирование и эксперимент показывают, что контраст изображения дефектов в секционной топографии на несколько порядков выше, чем в топографии сканирования. В частности, проекционное изображение краевой дислокации состоит из центральной части, которая напоминает розетку эффективных угловых разориентаций и кинематического изображения дислокационной линии, что опускается многими авторами. При увеличении толщины кристалла уменьшается угловая область отражения кристалла, что приводит к увеличению размеров изображения, при этом детали изображений сохраняются. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований грант 09-02-00731.

Смирнова Ирина Алексеевна, к.ф-м.н.
142432, г. Черноголовка, Московская обл., ул.Академика Осипяна д.2
Тел: 8(496)5227411; Факс: 8(496)5228160; E-mail: irina@issp.ac.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НЕКОТОРЫХ СОЕДИНЕНИЙ ВОЛЬФРАМА, РЕНИЯ И ПЛАТИНЫ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОГО НЕУПРУГОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ

Н.Ю.Смоленцев¹⁾, М.Сикора²⁾, К.О. Квашнина³⁾, П. Глатзел³⁾, А.В. Солдатов¹⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ Университет Науки и Техники, Краков, Польша

³⁾ Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

Метод резонансного неупругого рентгеновского рассеяния сочетает в себе спектроскопию рентгеновского поглощения и эмиссии. Это достигается путем регистрации выхода флуоресценции с помощью кристаллов-анализаторов, после возбуждения образца монохроматическим излучением за выбранным краем поглощения. При этом используется жесткое рентгеновское излучение, позволяющее проводить измерения без вакуума, в ходе химической реакции в растворе или в экстремальных условиях. Экспериментальные данные для ряда модельных соединений (за L_2 и L_3 краем Re и W в ReO_2 , ReO_3 , WO_2 и WO_3 и L_3 краем Pt в K_2PtCl_4 и K_2PtCl_6) были получены в Европейском центре синхротронного излучения (ID26).

Электронная структура исследуемых соединений была рассчитана методом функционала электронной плотности с базисом линейаризованных присоединенных плоских волн (Wien2k). Вычисленные таким образом матричные элементы дипольного перехода использовались при расчетах спектров резонансного неупругого рентгеновского рассеяния по уравнению Крамерса-Гейзенберга. Проведен анализ влияния различных упрощений к данному уравнению. Показано, что упрощенный подход учитывающий только одноэлектронные переходы позволяет получить хорошее согласие с экспериментом. Разница между спектрами за L_2 и L_3 краями воспроизводится при учете спин-орбитальных правил отбора. Проанализировано влияние основной вакансии. Показана возможность применения такой методики для анализа как свободных, так и занятых состояний соединений 5d-элементов, например таких как катализаторы и металлоорганические комплексы. Данный метод может быть использован не только для периодических систем, но и для молекул (при этом удобнее использовать метод молекулярных орбиталей, реализованный, например, в программе ADF).

Смоленцев Николай Юрьевич
344090, Ростов-на-Дону ул.П.Зопре, д.5
Тел.: (863)2975326; E-mail: smolentsev@mail.ru

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПО СПЕКТРАМ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ НАНОЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ ДО И ПОСЛЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ВОДОРОДА

В.В. Срабионян, А.Л. Бугаев, В.В. Прядченко, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев

Физический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Разработан метод определения параметров атомной структуры наночастиц многокомпонентного состава по данным спектроскопии рентгеновского поглощения (XAS). Метод включает Фурье-анализ различных энергетических областей XAS спектра и основан на: 1) принципиально различном характере энергетической зависимости амплитуд обратного рассеяния фотоэлектрона атомами металлов, образующих наночастицы, и относительно легкими атомами стабилизирующей среды; 2) установленной возможности разрешения близких межатомных расстояний, различающихся хотя бы на 0.003 нм, с помощью ограниченных по энергии областей спектра поглощения. В рамках метода разработана методика многопараметрической оптимизации Фурье-образов экспериментальных спектров, позволяющая преодолеть корреляции и неустойчивости в определяемых значениях структурных параметров. Метод позволяет: 1) устанавливать наличие у наночастицы архитектуры «ядро-оболочка», различающихся по атомному составу и строению; 2) определить долю атомов наночастицы, находящихся в химически-активном приповерхностном слое (в случае однородной по составу наночастицы), а также процентное соотношение долей атомов, формирующих ядро и оболочку для наночастиц сложного состава; 3) устанавливать длины связей поверхностных атомов наночастицы с атомами стабилизирующей среды. С помощью разрабатываемого метода определены структурные изменения наночастиц палладия на подложках Al_2O_3 и SiO_2 , происходящие после поглощения атомов водорода (K-спектры Pd получены проф. Ван Бок Ховеном, EТН, Цюрих). Изучена зависимость этих изменений от размера наночастиц.

Срабионян Василий Валерьевич, аспирант
344079, Ростов-на-Дону, пер. Боевой, д.12.
Тел.:(863)2452653; E-mail: bugaev@sfedu.ru

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ

В.А. Ткаль, М.Н. Петров, Н.А. Воронин, И.А. Жуковская, К.Г. Лукин

¹⁾ *Новгородский филиал Санкт-Петербургского государственного университета сервиса и экономики, Великий Новгород*

Расшифровка экспериментального контраста и идентификация дефектов структуры проводится визуально и во многом зависит от опыта и квалификации топографиста. Идентификация дефектов затруднена из-за наличия на топограмме или фотоснимке зашумляющих факторов – фоновой неоднородности и зернистости, практически невозможно различить близкорасположенные дефекты структуры. Применение различных методов цифровой обработки позволяет значительно повысить качество анализируемого контраста и повысить надежность идентификации, но оценка проводится опять же визуально и носит субъективный характер. В ряде случаев при расшифровке контраста возможны ошибки как в определении типа дефекта, так и его расположения в объеме монокристалла.

В данной работе рассматриваются различные методики количественной оценки качества цифровой обработки, повышающие надежность идентификации дефектов структуры различного типа, разрешения для различных монокристаллических материалов двух и более близкорасположенных дефектов структуры. Проверка методик проводилась как на тестовых объектах, в качестве которых использовались теоретические изображения дефектов структуры различного типа, рассчитанные по модифицированным уравнениям Инденбома-Чамрова и подвергнутые далее зашумлению и цифровой обработке, основанной на дискретном вейвлет-анализе – разновидности частотного анализа, так и на экспериментальном контрасте. В работе проводится сравнение эффективности различных методик количественной оценки эффективности цифровой обработки топографических и оптических изображений дефектов структуры различных монокристаллов. Показано, что применение этих методик позволяет устранить ошибки идентификации дефектов структуры, вызванные субъективным фактором, связанным с визуальным восприятием анализируемого контраста.

Ткаль Валерий Алексеевич, профессор, д.ф.-м.н.
173025, Великий Новгород, ул. Кочетова, 29, корп. 3.
Тел.: 8(8162)771921; Факс: 8(8162)616308; E-mail: Valery.Tkal@novsu.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СВОБОДНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А.Д.Федоренко¹⁾, Л.Н.Мазалов¹⁾, А.В.Калинкин²⁾, Е.В.Третьяков³⁾, В.И.Овчаренко³⁾,
Е.Ю.Фурсова³⁾

¹⁾ *ИНХ СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *ИК СО РАН, Новосибирск*

³⁾ *МТЦ СО РАН, Новосибирск*

В ряду комплексов переходных 3d-металлов со стабильными нитроксильными радикалами (НР) обнаружены магнитноактивные соединения, способные претерпевать магнитный фазовый переход в ферро-, ферри- или антиферромагнитное состояние или же структурные перестройки, способствующие возникновению магнитной аномалии – скачкообразного изменения какой-либо из магнитных характеристик. Одним из таких объектов являются комплексы переходных металлов с имидазолиновыми нитроксильными радикалами. Магнитные свойства таких комплексов определяются характером электронных взаимодействий парамагнитных центров металл-нитроксильная группа (M- N $\dot{\ominus}$ O).

В этой связи актуальным является изучение характера распределения интегральной электронной плотности и локализации неспаренной электронной плотности на атомах свободных и координированных радикалов.

Для интерпретации рентгеноэлектронных спектров были выполнены квантово-химические расчеты зарядовой и спиновой плотности свободных радикалов. Методом рентгеноэлектронной спектроскопии впервые проведено экспериментальное изучение характера распределения электронной и спиновой плотности нитроксильных радикалов, а также в ряду реперных диамагнитных и парамагнитных молекул. Проведены квантово-химические расчеты электронной структуры для соответствующих нитроксильных радикалов. Показана возможность использования метода РФЭС для анализа характера распределения спиновой плотности в нитроксильных радикалах и комплексах переходных металлов с имидазолиновыми лигандами.

Федоренко Анастасия Дмитриевна
630090, Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, д. 3
Тел.: (383)3165341; Факс: (383)3309489; E-mail: fad007@ya.ru

**ВЫСОКОДОЗОВАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ ИОНОВ АЗОТА
В ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ ПЛЕНКИ $Y_{2,95}La_{0,05}Fe_5O_{12}$**

И.М. Фодчук²⁾, У. Пич¹⁾, А. Давидок¹⁾, А. Бирманс¹⁾, Н. Пашняк¹⁾, С. Баловсяк²⁾,
Р. Заплитный²⁾, О. Бончик³⁾, Г. Савицкий³⁾, И. Выворотка³⁾, И. Яремий⁴⁾

¹⁾ Университет, Зиген, Германия

²⁾ Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Черновцы, Украина

³⁾ Институт прикладных проблем механики и математики НАН Украины, Львов, Украина

⁴⁾ Ивано-Франковский национальный университет им. В. Стефаника, Украина

Методами высокоразрешающей двух и трехосной рентгеновской дифрактометрии проведены исследования структурных изменений в поверхностных слоях разной толщине эпитаксиальных пленок $Y_{2,95}La_{0,05}Fe_5O_{12}$, после высокодозовой имплантации ионов азота ($E=50$ кэВ, $D_1=0,5 \cdot 10^{18}$ ион/см²; $D_2=1,5 \cdot 10^{18}$ ион/см², $D_3=5,0 \cdot 10^{18}$ ион/см²).

Предложена модель возможных структурных изменений в приповерхностных слоях пленок после ионной имплантации ионов азота. Определены распределения деформаций, толщины нарушенного слоя, средние и среднеквадратические смещения атомных слоев, степень аморфизации слоев. На распределение деформаций влияет ряд факторов, в частности, неоднородное распределение основных компонент и деформация несоответствия на границе раздела пленка-подложка. Толщина деформированного слоя растет с увеличением дозы облучения, отдельные разупорядоченные области перекрываются, образуя аморфный слой.

Используя программный пакет SRIM исследовано процессы взаимодействия ионов азота с атомами кристаллической решетки после имплантации. Наиболее вероятным является процесс генерации френкелевских пар (~ 65%). Средний объем разупорядоченного участка $V \sim 19 \text{ \AA}^3$. Преобладающими в процессе имплантации являются электронные энергетические потери ~70%, что составляет из условий эксперимента ~26 еВ/Å, средняя длина проективного пробега иона составляет ~845Å, количество образованных вакансий на ион ~182, эффективный радиус дефекта $r_{eff}=0,79 \text{ \AA} \pm 0.2 \text{ \AA}$.

Полученные с помощью метода АСМ данные, свидетельствуют о существенном изменении рельефа поверхности. Для пленки, облученной наибольшей дозой ионов рельеф поверхности наиболее неоднородный, наблюдаются характерные квазипериодические, с выраженной анизотропией локальные разупорядоченные области с перепадом высот до 20 нм и средними размерами ~0,15 мкм.

Фодчук Игорь Михайлович, профессор
58012, Черновцы, Украина, ул. Коцюбинского, 2
Тел.: (0372)44834; E-mail: ifodchuk@ukr.net

MAGNETIC PROXIMITY EFFECTS BY WAVEGUIDE-ENHANCED PNR

Ю.Н. Хайдуков^{1,2)}, B. Nagy³⁾, K.N. Zhernenkov⁴⁾, Yu.V. Nikitenko⁵⁾, L. Bottyan³⁾,
V.L. Aksenov^{2),5)}

¹⁾ Max-Planck Institute for Solid State Research, D-70569 Stuttgart, Germany

²⁾ Lomonosov Moscow State University, 119992 Moscow, Russia

³⁾ KFKI Research Institute for Particle and Nuclear Physics, Budapest, Hungary

⁴⁾ Ruhr-Universität Bochum, D 44780, Bochum, Germany

⁵⁾ Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia

Interplay between superconductivity (S) and ferromagnetism (F) in various S/F heterostructures results in a number of intriguing physical phenomena [1,2]. Proximity effects may modify the superconducting and magnetic order parameters. Such systems constitute a challenge for PNR since the effects are small and located to near the interface(s). An enhanced sensitivity method was suggested to reveal magnetization profiles at an S/F interface using a neutron waveguide (fig. and [3]).

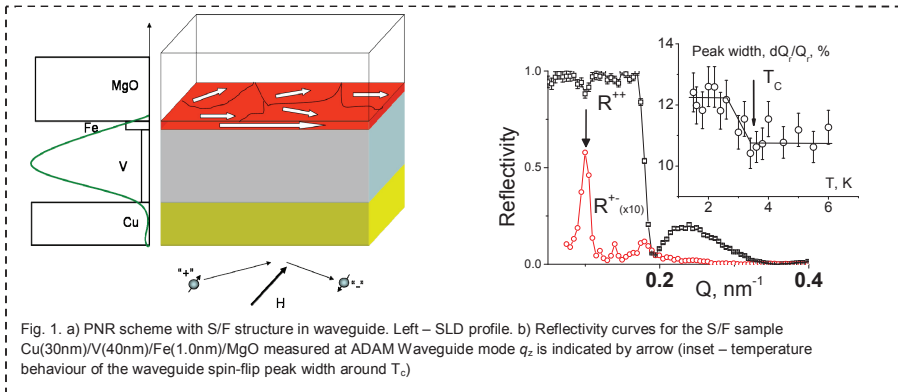


Fig. 1. a) PNR scheme with S/F structure in waveguide. Left – SLD profile. b) Reflectivity curves for the S/F sample Cu(30nm)/V(40nm)/Fe(1.0nm)/MgO measured at ADAM Waveguide mode q_z is indicated by arrow (inset – temperature behaviour of the waveguide spin-flip peak width around T_c)

S/F bilayers of V(40-80nm)/Fe(1-4.5nm) structure placed in a Cu/S/F/MgO waveguide were investigated by PNR at ADAM, V6, AMOR and NREX+. Temperature dependence of the spin-flip and diffuse intensities around waveguide mode q_z^{wg} will be reported to reveal a new magnetic state in the S layer below T_c , the superconducting transition temperature of the vanadium layer [4]. Gratefully acknowledged are projects OTKA K62272, NKTH NAP-VENEUS, RFBR 09-02-00566 and JINR-HAS EAI-2009/002.

1. F. S. Bergeret, A. F. Volkov and K. B. Efetov, Rev. Mod. Phys. 77 1321 (2005)
2. A.I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. 77, 935 (2005)
3. Yu.N. Khaydukov, Yu.V. Nikitenko, L. Bottyan et al., Cryst. Rep 55(7),1235-1247, 2010
4. Yu.N. Khaydukov, V.L. Aksenov, Yu.V. Nikitenko et al., J. of S.and Nov. Magn. 24, p. 961-968, 2011

Хайдуков Юрий Николаевич, к.ф.-м.н.
D-85747, Германия, Гархинг, Lichtenbergstr, 1
Тел.: +49-89-289-14769; Факс: +49-89-289-14911; E-mail: Yury.Khaydukov@frm2.tum.de

АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СМЕШАННЫХ Au-Co НАНОПРОВОДОВ

К.М.Цысарь, Е.М.Смелова, Д.И.Бажанов, А.М.Салецкий
Физический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва

Методом первопринципной молекулярной динамики проведено исследование магнитных свойств смешанных Au-Co нанопроводов с помощью программного кода VASP. Исследование атомной структуры Au-Co нанопровода показало, что наиболее стабильным к деформациям «растяжения-сжатия» является равномерно смешанный провод Au_{0.5}Co_{0.5} (Рис.1а). В результате проведенных первопринципных расчетов было обнаружено появление в проводе Au_{0.5}Co_{0.5} «гигантской магнитной

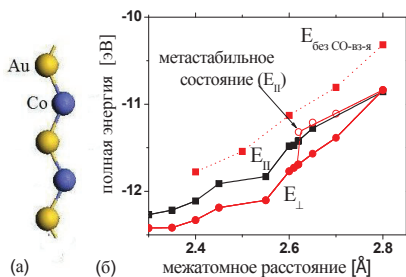


Рис.1 (а) Модель равномерно смешанного нанопровода Au_{0.5}Co_{0.5}, (б) зависимость величины полной энергии НП Au_{0.5}Co_{0.5} от среднего межатомного расстояния.

анизотропии» со значениями энергии магнитной анизотропии (МАЭ) ~135 мЭВ на атом Co в проводе (Рис.1б). Следует особо отметить, что значения МАЭ ~100мЭВ обнаружены экспериментально в слоистых магнитных Au/Co структурах и тонких пленках, состоящих из нескольких сотен атомов [1], поэтому получение значений МАЭ порядка 100мЭВ в нанопроводах в значительной степени неожиданно. В результате

проведенного в работе исследования была обнаружена зависимость магнитных анизотропных свойств Au-Co нанопроводов от их атомной структуры (Рис.1б). Расчеты полной энергии системы, проведенные для двух возможных положений оси намагничивания провода – вдоль его оси и перпендикулярно ей - показали, что ось легкого намагничивания в проводе перпендикулярна оси провода. В результате расчетов было установлено, что при растяжении провода Au_{0.5}Co_{0.5} до межатомного расстояния >2.65Å в системе появляется метастабильное состояние с направлением оси легкого намагничивания, совпадающей с осью симметрии нанопровода (Рис.1б). Однако при этом значения МАЭ уменьшаются до величины - 20 мЭВ на атом Co в проводе.

1. P. Beauvillain, J.Magn.Magn.Mater 121 1-3, (1993), p. 503-505

Цысарь Ксения Михайловна, в.и.
119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 2, МГУ, Физический факультет
Тел.: 8(499)1297353; Факс: 8(495)9391489; E-mail: smelova_k_m@mail.ru

СПИНОВАЯ СТРУКТУРА МАГНИТНЫХ СПИРАЛЕЙ В КРИСТАЛЛАХ ТИПА MnSi

В.А.Чижиков, В.Е.Дмитриенко

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

Энергию спиновой структуры хиральных ферромагнетиков типа MnSi, можно записать в приближении взаимодействия ближайших спинов как:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j' (-J \bar{s}_i \bar{s}_j + \bar{D}_{ij} [\bar{s}_i \times \bar{s}_j]),$$

где первая сумма берётся по всем магнитным атомам (Mn) системы, вторая – по ближайшим соседям данного атома, $J > 0$ – константа обменного взаимодействия, \bar{D}_{ij} – вектор Дзялошинского–Мория связи. Первый член в скобках ответственен за ферромагнитное упорядочение, второй, меньший по величине, член стремится выстроить соседние спины перпендикулярно друг другу, а их противодействие приводит к возникновению различных магнитных структур: от простой спирали ниже температуры фазового перехода ферромагнетик–парамагнетик до более экзотичных (скирмионы; обсуждается существование кубических фаз, подобных голубым фазам в жидких кристаллах, и др.) – вблизи этой температуры. Спиральные, а также более нетривиальные структуры, такие как скирмионы, успешно описываются в континуальном приближении, в котором магнитные моменты отдельных атомов заменяются полем вектора намагниченности. Однако при этом связь с локальными структурными особенностями теряется и в лучшем случае учитывается точечная симметрия кристалла. Микроскопическая же теория на языке классических спинов до сих пор не построена до конца даже для простейшего случая спиральной магнитной структуры. Решение модели, основанной на приведённом выше выражении для энергии, которому и посвящена данная работа, позволяет лучше понять локальные механизмы образования магнитных структур; связать феноменологические константы континуального приближения с параметрами взаимодействия отдельных спинов (J , \bar{D}_{ij}), в свою очередь вычисляемых из квантовой механики; и, надеемся, даст возможность предсказывать новые магнитные структуры в кристаллах типа MnSi.

Работа поддержана Программами фундаментальных исследований Президиума РАН №22П ("Резонансная дифракция рентгеновских лучей и топография запрещенных рефлексов") и "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества", а также грантом РФФИ 10-02-00768.

Чижиков Вячеслав Анатольевич, с.н.с.

119333, Москва, Ленинский пр-т, 59, Институт кристаллографии РАН

Тел.: 8(499)1356240; Факс: 8(499)1351011; E-mail: chizhikov@ns.crys.ras.ru

МЕТОДЫ РЕКОНСТРУКЦИИ В РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ

М.В. Чукалина¹⁾, Д.П. Николаев²⁾, А. Симионовичи

¹⁾ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка*

²⁾ *Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН, Москва*

³⁾ *Observatoire des Sciences de l'Univers de Grenoble, France*

В работе представлены алгоритмы реконструкции изображения по набору проекций рентгеновской флуоресцентной томографии в параллельной схеме с использованием микрозонда. Показано, что полученное недавно аналитическое решение [E.X. Miqueles, A.R. De Pierro, "Exact analytic reconstruction in x-ray fluorescence CT and approximate versions", *Physics in Medicine and Biology*, 55, 1007-1024, 2010.] применимо только для ограниченного класса объектов. Представлено описание этого класса. Анализируются результаты работы итерационного алгоритма. Расчеты проведены для модельных идеальных проекций и проекций с шумом.

Алгоритм реконструкции с учетом формы микрозонда также представлен в работе. Показано, что при условии использования схемы быстрого расчета преобразования Хафа, вычислительная итерационная схема позволяет восстанавливать изображение за время, не превышающее время проведения эксперимента. Сравняются результаты реконструкции с учетом и без учета формы зонда. Рассмотрены как случаи, когда распределение интенсивности в зонде может быть аппроксимировано функцией Гаусса, так и случаи, когда аппроксимация не применима.

В заключении представлен алгоритм расчета финального мультиспектрального изображения, сохраняющего границы областей. Изображение рассчитывается с использованием восстановленных изображений для всех линий спектра, зарегистрированных в ходе эксперимента по рентгеновской флуоресцентной томографии.

Чукалина Марина Валерьевна, с.н.с.

142432, Черноголовка, Институтская., д.6

Тел.: (495)9628074; Факс: (495)9628074; E-mail: marina@ipmt-hpm.ac.ru

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙНИЯ
НЕЙТРОНОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ДИНАМИКИ НА ПРИМЕРЕ ДНК-ТРАНФЕРАЗ**

А.В.Щвецов, Ю.П.Гармай, Д.В.Лебедев, М.Г.Петухов, В.В.Исаев-Иванов

Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Благодаря бурному развитию вычислительной техники в последние годы одним из наиболее активно развивающихся методов теоретического исследования биологических систем является метод молекулярной динамики в периодических водных боксах. Этот метод позволяет строить модели различного уровня детализации для биологических систем на широком диапазоне размеров систем и широком диапазоне времен. Такие модели позволяют рассматривать явления связанные с крупномасштабной конформационной подвижностью белков, а также их комплексов на атомарном уровне, что позволяет находить подвижные домены в белках. Это позволяет строить динамически модели белков пригодные для интерпретации данных малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей.

В данной работе мы продемонстрировали построение динамических моделей белков на примере ДНК-связывающих белков, таких как RecA из *E.coli* и *D. Radiodurans*. Для белка RecA из *D. Radiodurans* было показано, что движения С-концевого домена зависят от связывания белком кофакторов (АТФ, онДНК, днДНК), что можно выделить 7 подвижных доменов внутри белка, а так же что данные полученные методами молекулярной динамики для различных комплексов филаментов белков RecA (12-мер, 3-мер с различными комбинациями кофакторов) можно сопоставить с данными малоуглового рассеяния нейтронов.

Щвецов Алексей Валерьевич, м.н.с
188300 г.Гатчина, Орлова Роща, ОМРБ ПИЯФ РАН
Тел.: (81371)46660; Факс: (81371)32303; E-mail: alexxy@omrb.pnpi.spb.ru

СЕКЦИЯ V

Численные методы, компьютерное
моделирование, теория рассеяния и
дифракции

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ИССЛЕДОВАНИЕ ФТАЛОЦИАНИНА НИКЕЛЯ ДОПИРОВАННОГО ЩЕЛОЧНЫМИ МЕТАЛЛАМИ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Л.А.Авакян¹, А.С.Манукян², А.А.Мирзаханян², Э.Г.Шароян², Я.В.Зубавичус³,
А.А.Тригуб³, В.Г.Власенко¹, А.В.Солдатов¹, Н.А.Колпачева¹, Е.А.Козинкина¹,
Л.А.Бугаев¹

¹

^{2Армения}

³

Фталоцианины являются перспективными материалами для конструирования LED/OLED элементов, их исследование и синтез являются актуальной задачей в области магнетизма молекулярных и органических материалов. Недавно был разработан метод синтеза комнатно-температурных ферромагнитных образцов фталоцианина никеля (NiPc), допированных атомами калия и рубидия, которые сохраняют оптические свойства фталоцианиновых пигментов и обладают магнитной структурой.

Для выяснения природы ферромагнетизма в этих соединениях и для определения локального окружения никеля образцы изучались как методами Фурье-анализа экспериментального Ni K-XAFS спектра, так и методами *ab initio* расчетов, основанных на теории функционала плотности, взаимодополняющими друг друга.

Проведено уточнение атомной структуры NiPc, подтвержденное *ab initio* расчетами, согласно которому, межатомное расстояние Ni-N превышает дифракционные данные и составляет ~ 1.91 Å. С помощью Фурье-анализа и прямого расчета спектров, выполненных на основе различных моделей ближнего окружения атомов Ni, Rb в изучаемых материалах, установлены местоположения допированных атомов в исходной матрице, а также характер локальных структурных искажений в координационном окружении атома металла.

Авакян Леон Александрович,
344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5
Тел.: 8(918)5630854; E-mail: laavakyan@sfedu.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ПРОЦЕССОВ ДВОЙНИКОВАНИЯ КУБИЧЕСКИХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

М.Ш. Акчурин, Р.В. Гайнутдинов, Р.М. Закалюкин, И.И. Купенко

Институт кристаллографии РАН, Москва

Многие кристаллические материалы при высоких напряжениях могут пластически деформироваться без участия дислокаций. Методами электронной и атомно-силовой микроскопии изучена деформационная структура, образующаяся при действии сосредоточенной нагрузки на монокристаллы NaCl, NaF, LiF, MgO, Lu₂O₃, Y₂O₃ и Y₃Al₅O₁₂. Деформирование осуществлялось алмазной пирамидкой Виккерса при комнатной температуре.

Показано, что основным механизмом пластической деформации данных монокристаллов являются процессы двойникования.

Проведено моделирование двойников в структурах изучаемых монокристаллов, а так же произведены энергетические оценки их образования. Двойники получали вращением части структуры в плоскости (111) вокруг оси 3-го порядка на 60°. Энергетические оценки были основаны на сравнении статической энергии монокристалла и соответствующего двойника. Статическая энергия оценивалась с помощью парных полуэмпирических потенциалов: кулоновский потенциал, потенциал Борна-Майера, отвечающий за короткодействующее отталкивание, потенциал Ван-дер-Ваальса и потенциал Морзе, имитирующий ковалентное взаимодействие. Расчёты показали, что появление двойника заметно меняет энергию решётки, причём в ГЦК структурах наблюдается прямая корреляция с твёрдостью материала.

Предложены механизмы релаксации возникающих напряжений, основанные на изменении стехиометрии в близлежащих к плоскости двойникования слоях.

Обсуждается определяющая роль механизмов двойникования в процессах образования высокопрозрачных оптических керамик.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №11-02-00250-а

Акчурин Марат Шихапович, д.ф.-м.н.
119333, Москва, Ленинский просп., 59, Институт кристаллографии РАН
Тел.: 8(495)3338274; E-mail akchurin@ns.crys.ras.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙЯНИЯ БЕЛКОВ – ШАПЕРОНИНОВ В РАЗЛИЧНЫХ КОНФОРМАЦИЯХ

С.В. Амарантов¹⁾, И.Н. Налётова²⁾, Л.П. Курочкина³⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва,*

²⁾ *Институт физико-химической биологии им. А.Н.Белозерского, при МГУ, Москва,*

³⁾ *Институт биоорганической химии им. ак. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва*

Методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР) был проведён анализ конформаций формы макромолекул в растворе имеющих топологически двусвязную поверхность. С этой целью в качестве объектов исследования были выбраны макромолекулы вирусных и бактериальных шаперонинов, формы которых можно описать формфакторами (ФФ) одиночного и двойного эллиптических торов [1]. А именно, нами исследовались: 1. хорошо известный бактериальный шаперонин GroEL; 2. малоизученный вирусный (фаговый) шаперонин, кодируемый геном 146 (gene product, GP146) бактериофага EL *Pseudomonas aeruginosa*; 3. комплекс эукариотического цитоплазматического шаперонина TRiC.

Все шаперонины являются АТФ-азами, использующими энергию, получаемую при связывании и гидролизе АТФ, для осуществления конформационных перестроек. При построении формы моделей этих макромолекул по кривым МУР было использовано три различных подхода: 1. Метод функции оболочки на основе разложения функции формы в ряд Фурье по сферическим гармоникам; 2. Метод пространственного сворачивания аминокислотных остатков (а.к.о.) путём случайного перебора конфигураций через вращения а.к.о. с использованием ФФ аминокислоты; 3. Поиск параметров модели заданной своим ФФ в виде двойного эллиптического тора, как функции трёх геометрических параметров $a_1 = a_2$, $b = b_1 = b_2$, $c_1 = c_2$ и модуля вектора рассеяния с дальнейшим поиском этих параметров по кривым МУР. В результате было показано: во-первых, в зависимости от внешних условий для вирусного шаперонина GP146 при сохранении габаритных размеров частицы и радиуса инерции возможен конформационный переход от симметричной формы, описываемой моделью двойного эллиптического тора к несимметричной форме с параметрами $a_1 \neq a_2$, $b, c_1 \neq c_2$ [2], во-вторых, по кривым МУР было определено, что TRiC in vitro находится в закрытом состоянии.

1. Амарантов С.В. ЖЭТФ, 2009, т.135, вып.4, с. 721-737.

2. Амарантов С.В., Налётова И.Н., Курочкина Л.П. ЖЭТФ, 2011, т.139, вып.6, (в печати).

Амарантов Сергей Владимирович, м.н.с.

119333, Москва, Ленинский пр., д.59

Тел.: 8(499)1355450; E-mail: amarantov_s@mail.ru

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ПОВЫШЕНИЯ РАЗМЕРНОСТИ МОДЕЛИ НЕЗАВИСИМЫХ ИСТОЧНИКОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА, ГЕНЕРИРОВАННЫХ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

А.Н. Амрастанов¹⁾, С.А. Гинзгеймер¹⁾, М.А. Степович²⁾

¹⁾ *Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана, Калуга*

²⁾ *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, Калуга*

Целью работы является дальнейшее развитие модели диффузии генерированных в полупроводнике неосновных носителей заряда (ННЗ) электронным пучком, предложенной в [1].

При проведении расчетов используется рассмотрение независимых источников в двумерном срезе. При решении задач такой подход позволяет отказаться от допущения осесимметричности следа пучка на поверхности исследуемого образца.

Несмотря на увеличение емкости вычислений, такой подход позволяет, прежде всего, провести качественную оценку более простого в исполнении, а потому и используемого в практике, метода, предложенного в [1]. Еще одним преимуществом предложенной модели являются возможности дальнейшего изучения диффузионных процессов ННЗ, генерированных в полупроводнике электронным пучком.

1. Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А. Использование модели независимых источников для расчета распределения неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком // Изв. РАН. Сер. физ. – 2002. – Т. 66, № 9. – С. 1317-1322.

Амрастанов Анар Назим
117198, Калуга, ул. Моторная, д.48, кв.13
Тел.: 8(903)8148007; E-mail: an_amr@mail.ru

АЛГОРИТМ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Н.М. Андрушевский, В.П. Горьков, Б.М. Щедрин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Определение пространственной структуры наночастиц по интенсивности диффузного рассеяния существенно облегчается в случае, когда изучаемые объекты обладают центром симметрии. В этом случае Фурье-преобразование $F(\vec{q})$ функции электронной плотности $\rho(\vec{r})$ является вещественной знакопеременной функцией. Реконструкция Фурье-образа по значениям $|F(\vec{q})|$ сводится к определению правильного чередования ее областей положительности и отрицательности. В основе алгоритма лежит тот факт, что в некоторой окрестности начала координат обратного пространства $F(\vec{q})$ положительна, а смена знака этой функции происходит в точках $|F(\vec{q}_0)| = 0$. Поскольку экспериментальные значения интенсивности рассеяния измеряются в дискретном наборе точек, то границы смены знака $F(\vec{q})$ можно установить приближенно с точностью до длины шагов дискретизации. Однако погрешность восстановления будет незначительна, так как эти погрешности возникают тогда, когда значения $F(\vec{q})$ малы. Оценку качества восстановления знаков функции $F(\vec{q})$ можно контролировать по результатам синтеза электронной плотности вне наночастиц, при этом частота измерений $|F(\vec{q})|$ должна превышать частоту Найквиста в два раза.

Предложенный алгоритм относится к классу прямых методов, так как можно, минуя стадию интерпретации функции Патерсона (автокорреляционной функции электронной плотности), восстановить $\rho(\vec{r})$ по реконструированным значениям Фурье-образа.

Андрушевский Николай Матвеевич, с.н.с.

119992, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М. И. Ломоносова, факультет ВМК

Тел.: (499)9391882; E-mail: nandrush@cs.msu.su

СИНХРОТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОТЕРЬ ЭЛЕКТРОНОВ И РАСЧЕТЫ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ АЛМАЗА

Е.А. Антонов, В.В. Соболев, В.Вал.Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Переход между двумя уровнями энергиями имеет две компоненты: поперечную, возбуждаемую светом, и продольную, возбуждаемую быстрыми электронами в спектрах характеристических потерь энергии электронов. Интенсивность непрямых переходов очень мала для поперечной компоненты и сопоставима с интенсивностью прямых переходов у продольной компоненты [1,2]. Быстрые электроны могут передавать валентным электронам твердого тела часть своего волнового вектора \mathbf{q} с возможностью непрямых переходов из центра зоны Бриллюэна в точки ее поверхности. Поэтому спектры потерь электронов $-\text{Im}\varepsilon^{-1}(\mathbf{E}, \mathbf{q})$, естественно зависят от ориентации кристалла относительно направления падения быстрых электронов, в том числе и для кубических кристаллов. Это открывает принципиально новый метод зондирования зон проводимости даже таких кубических кристаллов как алмаз. В работе [2] измерены спектры $-\text{Im}\varepsilon^{-1}(\mathbf{E}, \mathbf{q})$ алмаза в области 0-50 эВ для $|\mathbf{q}|=(0.15\pm 1.7)\text{Å}^{-1}$ и трех направлений кристалла: $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$. Эти спектры существенно зависят от величины переданного волнового вектора \mathbf{q} и ориентации кристалла. На их основе были рассчитаны спектры диэлектрической проницаемости и остальных квазиоптических функций для случая потерь энергий электронов. Расчеты выполнены с помощью компьютерных программ, обычно применяемых к расчетам спектров комплекса оптических функций (ε_1 , ε_2 , k , n , α , $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$, n_{eff} и др.) [3]. Установлены основные особенности полученных спектров комплекса функций и их зависимости от величины $|\mathbf{q}|$. Получены новые данные о дисперсии зон проводимости.

1. Egerton R.F. EELS in Electron Microscope. (New-York: Plenum) 230 p. (1996).
2. Waidmann S., Knupfer M., Arnold B. Phys.Rev.B. 61, 10149 (2000).
3. Соболев В.В., Неможаленко В.В. Электронная структура полупроводников. (Киев: Наук. Думка) 423 с. (1988).

Антонов Егор Александрович
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

О ПРИЧИНЕ СМЕНЫ КОНТРАСТА НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ МИКРОТРУБОК В SiC С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Т.С.Аргунова^{1,2)}, В.Г.Кон³⁾, J.H.Je²⁾

¹⁾ *Физико-технический институт РАН им. Иоффе, Санкт-Петербурге*

²⁾ *Pohang University of Science and Technology, Pohang, Republic of Korea*

³⁾ *Национальный исследоват. центр «Курчатовский Институт», Москва*

Микротрубки малого диаметра являются частью микроструктуры различных объектов: кристаллов (например, дислокации с полыми ядрами в SiC, микроканалы в синтетическом кварце); биологических, полимерных материалов и т.д. Для исследования микротрубок используют различные методы, среди которых наиболее прямым и неразрушающим является метод фазовоконтрастного изображения в белом пучке синхротронного излучения (СИ).

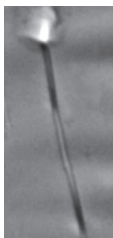


Рис. 1. Микротрубка в SiC.

Такие изображения, как правило, имеют вид светлой полосы, окруженной более тонкими темными полосами [1]. Такого же типа изображения получаются при численном моделировании изображений с использованием методов расчета фазовоконтрастных изображений на основе пропатора Киркгофа для монохроматического излучения. Спектр реального излучения учитывается в предположении, что разные частоты некогерентны.

Однако в экспериментах иногда изображения микротрубок меняют свой контраст на противоположный, то есть в центре появляется черная полоса, окруженная более светлыми областями (Рис. 1). Причина смены контраста долгое время казалась загадочной, что мешало получать 3D изображения таких объектов. В данной работе показано, что одной из причин может являться тот факт, что ориентация микротрубки изменяется таким образом, что ее ось составляет малый угол с направлением пучка СИ. Указанная ситуация исследована теоретически с использованием как аналитических так и численных методов.

1. V.G.Kohn, T.S.Argunova, J.H.Je, J. Phys. D: Appl. Phys., 2010, 43, 442002, p. 1-3

Татьяна Сергеевна Аргунова, с.н.с., к.ф.м.н.

194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.26

Тел.: (495)3396723; Факс: (499)1965973; E-mail: argunova2002@mail.ru

ПОСТРОЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ СЕЧЕНИЙ ПРИ ПОИСКЕ МОДЕЛИ ПЛЕНКИ В РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

С.Б.Астафьев¹⁾, Б.М.Щедрин^{1, 2)}, Л.Г.Янусова¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Московский государственный университет, ф-т ВМиК, Москва*

Целью рефлектометрического эксперимента является восстановление профиля электронной плотности вглубь пленки путем поиска параметров модели, соответствующей минимуму функционала невязок χ^2 между модельной и экспериментальной кривыми зеркального рентгеновского рассеяния. Модель обычно представляют в виде набора ступенчатых слоев, где каждый слой описывается четырьмя параметрами: толщиной d , составляющими электронной плотности δ и β , и шероховатостью σ , характеризующей область сглаживания скачка плотности на границах слоев. Параметры электронной плотности и шероховатости не являются в полной мере линейно независимыми, что приводит к необходимости поиска оптимальной модели среди возможных решений, соответствующих локальным минимумам с близкими χ^2 , но разными значениями δ и σ . Авторами предложен метод построения и анализа двумерных сечений функционала χ^2 , позволяющий наблюдать движение локальных минимумов при изменении одновременно двух параметров модели и облегчающий поиск глобального минимума в заданной области параметров. Алгоритм вычисления двумерных сечений реализован в пакете программ BARD [1]. Для отображения сечений функционала используется связь со средой Matlab. Получаемые зависимости позволяют оценивать устойчивость получаемых решений и делать вывод об их однозначности. Метод эффективен на начальных этапах оценки средней плотности и шероховатости поверхности пленки в целом, а в случае однослойной пленки построения двумерного сечения может оказаться достаточно для обнаружения глобального минимума, соответствующего искомому решению. Возможности использования двумерных сечений продемонстрированы на примере восстановления параметров δ и σ пленки из слоя молекул цинковой диады порфирина-фуллерена, а также для анализа модели пленки более сложной структуры.

1. Кристаллография, 2011, том 56, с. 776-785

Астафьев Сергей Борисович, с.н.с.

119333, Москва, Ленинский пр-т, д.59.

Тел.: 8(499)1350229; Факс: 8(499)1351011; E-mail: serge@crys.ras.ru

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ОЦЕНОК МНК И МНМ

А.Г. Белов, Б.М. Щедрин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Общим методом оценивания параметров в регрессионной модели с заданным распределением ошибок измерений является метод максимального правдоподобия (ММП). Этот метод в зависимости от закона распределения ошибок приводит к разным результатам. В случае нормального закона распределения он эквивалентен методу наименьших квадратов (МНК), а в случае распределения Лапласа – методу наименьших модулей (МНМ). Эффективность получаемых при этом оценок равна единице. Тем самым, ответ на вопрос о применении МНК или МНМ исходит из точного знания закона распределения ошибок. Однако, если предполагаемый вид распределения ошибок расходится с истинным, то эффективность оценок, получаемых от применения способа обработки, будет меньше единицы.

Качество оценок МНК и МНМ можно контролировать с помощью относительной эффективности выборочных среднего и медианы распределения ошибок измерений. Так, если в нормальном случае для оценивания параметров модели использовать МНМ, то получаемые оценки будут в $\pi/2 \approx 1,57$ раза менее эффективнее, нежели МНК. В случае же Лапласа использование МНМ в два раза более эффективно МНК. Эти факты созвучны с известными относительными эффективностями выборочного среднего и медианы в оценивании параметра положения для соответствующих распределений. Аналогичные выводы относительно эффективности оценивания параметров моделей МНК и МНМ могут быть легко рассчитаны для других распределений ошибок измерений.

Белов Андрей Григорьевич, н. с.
119991, Москва, Ленинские горы, д.1, строение 52
Тел.: 8(495)9391883; E-mail: belov@cs.msu.su

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ РЕНИЯ С ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

А.В.Бондарев, В.В.Ожерельев, И.Л.Батаронов, Ю.В.Бармин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование атомной структуры аморфных сплавов систем $\text{Re}_{100-x}\text{-Tb}_x$ ($x=18-89$ ат. %), $\text{Re}_{100-x}\text{-Hf}_x$ ($x=4-91$ ат. %), $\text{Re}_{100-x}\text{-Ta}_x$ ($x=10-45$ ат. %), а также чистого аморфного рения. В качестве начальной атомной конфигурации бралось случайное расположение 10000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Для численного решения уравнений движения использовался алгоритм Верле в скоростной форме. Межатомное взаимодействие описывалось с помощью разработанного нами полиномиального потенциала.

Модельные радиальные функции распределения (РФР) $G(r)$ хорошо согласуются с функциями $G(r)$, полученными из рентгенодифракционного эксперимента. По полным и парциальным РФР вычислены значения параметров топологического и композиционного ближнего порядка: радиусы координационных сфер r_i , координационное число первой сферы Z_1 и среднеквадратичное отклонение положений атомов в первой сфере $\sigma(r_1)$. Установлено, что в рассматриваемых сплавах отношение радиусов координационных сфер R_i/R_1 и координационное число первой сферы не зависят ни от природы, ни от концентрации атомов второго компонента.

С использованием многогранников Вороного проведен статистико-геометрический анализ моделей. Рассчитаны распределения многогранников по числу граней, граней по числу сторон и распределения по топологическим индексам $n_3-n_4-n_5\dots$. Рассчитаны распределения многогранников Вороного по объемам и по площадям граней. Для модели чистого аморфного Re на основе разбиения Вороного–Делоне выполнен анализ межатомных пор, определены их характерные размеры и закономерности пространственного расположения.

Бондарев Алексей Владимирович, доцент
394026, Воронеж, Московский просп., 14
Тел.: (473)2747314; Факс: (473)2463277; E-mail: bondarev@vmail.ru

КРОСПЛАТФОРМЕННОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕНТГЕНО-ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ РЛСЭ НА ОСНОВЕ ВОЛНОВОЙ ОПТИКИ

А.В. Бузмаков¹⁾, Дж. Джелони²⁾, Х. Зинн²⁾, Л.Самойлова²⁾, О. Чубарь³⁾

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

²⁾ *European XFEL, Hamburg, Germany*

³⁾ *Brookhaven National Laboratory, USA*

Рентгеновский лазер на свободных электронах (РЛСЭ) - сложный научно-исследовательский комплекс. Для оптимизации параметров РЛСЭ необходимо проводить предварительное аккуратное моделирование всех процессов, включая расчёт волнового фронта генерируемого длинными ондуляторами РЛСЭ, распространение рентгеновского излучения через каналы РЛСЭ и его взаимодействие с оптическими элементами и исследуемыми образцами.

Мы разрабатываем новое программное обеспечение для расчёта и оптимизации параметров РЛСЭ. Новый пакет программного обеспечения будет поставлять набор свободно распространяемых утилит, предназначенных для: расчета источника излучения, включая спонтанное и частично когерентное излучение SASE ондуляторов РЛСЭ; расчета распространения когерентного рентгеновского излучения через канал РЛСЭ; в частности, после отражения от зеркал скользящего падения, дифракционных решеток и кристаллических монокроматоров; выбора параметров оптических элементов для экспериментальных станций, например, фокусирующих зеркал, зонных пластинок, апертур и т.д.

Программный комплекс будет базироваться на расширенной библиотеке SRW [1] и наборе скриптов для MATLAB и Python для доступа к функциям библиотеки. Будут приведены примеры моделирования каналов РЛСЭ целиком. Разработанное программное обеспечение может быть использовано экспериментальными группами и отвечающими за научное оборудование, как для планирования экспериментов, так и для обработки полученных данных. Оно в дальнейшем будет разрабатываться и поддерживаться Европейским XFEL и будет свободно доступно научному сообществу.

1. O.Chubar, P. Elleaume, in Proceedings of EPAC-98 (1998), 1177

Бузмаков Алексей Владимирович
119333, г.Москва, Ленинский пр., 59
Тел: 8(499)1355100 E-mail: buzmakov@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЗОСТРУКТУРЫ МОНОДИСПЕРСНЫХ ПОРОШКОВ ГИДРОКСОКАРБОНАТА ИТТРИЯ МЕТОДОМ МУРН

А.С.Ванецев¹⁾, И.Г.Чувашова¹⁾, Г.П.Копица²⁾, V.Haramus³⁾, О.М.Гайтко¹⁾,
М.Н.Соколов¹⁾

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

²⁾ *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина*

³⁾ *GKSS Research Centre, Гестахт, Германия*

Для получения порошков люминофоров с высокой степенью монодисперсности особенно перспективными являются подходы «мягкой химии», позволяющие значительно сократить временные и энергетические затраты при синтезе дисперсных материалов. В частности, для синтеза порошков оксидов РЗЭ хорошо зарекомендовал себя метод медленного высокотемпературного гидролиза солей в водных растворах в присутствии мочевины.

Основной целью настоящей работы являлось исследование влияния параметров синтеза на мезоструктуру монодисперсных порошков гидроксокарбонатов РЗЭ, характеризующиеся частицами сферической формы и получаемых в ходе медленного гидролиза соответствующих нитратов в присутствии мочевины при микроволновом воздействии. Объектом исследования в работе были монодисперсные порошки $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$.

Методами МУРН и растровой электронной микроскопии проведено исследование влияния рН раствора и мольного избытка мочевины на микроморфологию и мезоструктуру монодисперсных порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$. Показана возможность направленного синтеза монодисперсных порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$ с частицами заданного размера в диапазоне 50-500 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (№ 09-03-01067-а и 10-02-91167-ГФЕН_а), а также гранта Президента Российской Федерации для поддержки российских молодых ученых (МК-2607.2011.3).

Ванецев Александр Сергеевич, старший научный сотрудник

119991, Москва, Ленинский просп., д.31

Тел.: 8(495)6338503; Факс: 8(495)9541279; E-mail: vanetsev@gmail.com

АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДИК ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Н.А. Воронин, В.А. Ткаль, М.Н. Петров, И.А. Жуковская, К.Г. Лукин

¹⁾ *Новгородский филиал Санкт-Петербургского государственного университета
сервиса и экономики, Великий Новгород*

Наиболее полное выделение на экспериментальном контрасте

Информативность топографических и оптических методов исследования структурного совершенства монокристаллов и надежность идентификации дефектов структуры значительно повышаются, если применить для повышения качества экспериментального контраста цифровую обработку. Повышая качество анализируемого контраста, устраняя зашумляющие факторы (слабую контрастность, фоновую неоднородность, зернистость), удается надежно выявить на топограмме и фотоснимке ранее визуально не регистрируемые особенности изображений дефектов структуры, а также более точно оценить их концентрацию. Цифровая обработка может быть основана как на анализе яркостных, так и частотных характеристик экспериментального контраста. Наиболее перспективными оказались методы, основанные на дискретном вейвлет-анализе, позволяющие в большей степени выявить низкочастотные особенности изображений дефектов, более точно локализовать дефект в объеме монокристалла. Эффективность дискретного вейвлет-анализа зависит от выбора вейвлет-базиса и используемого алгоритма цифровой обработки. Идентификация дефектов структуры различного типа проводилась сопоставлением экспериментальных изображений, подвергнутых цифровой обработке, с теоретически рассчитанными по модифицированным уравнениям Инденбома-Чамрова. Исследовался экспериментальный контраст, полученный топографией на основе эффекта Бормана (метод РТБ) и поляризационно-оптическим анализом. Доступность современных персональных компьютеров большой мощности для широкого круга специалистов позволяет проводить обработку больших по размеру топограмм и фотоснимков, значительно уменьшить время цифровой обработки.

Воронин Никита Антонович, аспирант
173025, Великий Новгород, ул. Кочетова, 29, корп. 3
Тел.: 8(8162)659208; Факс: 8(8162)616308; E-mail: nikitun85@mail.ru

SPATIAL DISTRIBUTION OF NEUTRONS SCATTERED BY GE SINGLE CRYSTAL EXCITED WITH HIGH - FREQUENCY ULTRASOUND

В.Н.Гаврилов¹⁾, E.Raitman¹⁾, D.Mjasishev¹⁾, A.Hoser²⁾, O.-S. Seidel²⁾, J. Stanh³⁾

¹⁾ *Institute of Physical Energetics, Riga, Latvia*

²⁾ *Helmholtz Centrum Berlin, Germany*

³⁾ *Paul Sherer Institute, Villigen, Switzerland*

The dynamical diffraction of neutron in perfect single crystals undergoing to the ultrasonic excitation were studied and the so-called Kato's profiles were observed. As preliminary calculations of the Kato's equation (taking into account ultrasonic excitation) have shown, one can expect for regime of small ultrasound waves amplitudes the fine oscillations in spatial neutron intensities distribution, and sharp increase of intensity in the Bormann triangle center for the high level ultrasonic excitation depending on the ultrasound frequency and samples thickness. The aim of the experiments was to determine how high frequency vibrations introduced into a perfect crystal effect of Kato's profiles in thick Ge single crystal.

It was shown that the intensities growth in the center is very pronounced and: i) for relatively small AW amplitudes at least 3-4 "sound" fringes (oscillations) are pronounced and their sizes agrees with theoretical evaluations. The resolutions was not enough but the situation can be improved; ii) the intensities in the center of the Kato's profile sharply increases with AW amplitudes growth and gain factor of 10 was achieved . These results can be explained using many phonon approximation and may be promising for an intensity –to- resolution governed by ultrasound monochromator creating.

Гаврилов Виктор Николаевич, д.ф.н.

LV-1035, ул.А.Биезиня 4-35

Тел.: (+371)67558678 Факс: (371)67558389 E-mail: eraitmans@apollo.lv

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МНОЖИТЕЛЯ ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ БЕСКОНЕЧНОГО ЦИЛИНДРА ПРИ СЪЁМКЕ В ГЕОМЕТРИИ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА

А. А. Гогин^{1,2)}, С. Н. Сульянов^{1,3)}, Н. Boysen⁴⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, г. Москва, Россия*

²⁾ *Московский университет, физический факультет, г. Москва, Россия*

³⁾ *Курчатовский Центр СИиНТ, г. Москва, Россия*

⁴⁾ *Университет LMU Muenchen, Garching, Германия*

Расчёт множителя поглощения в геометрии Дебая-Шеррера для случая, когда исходный и дифракционные пучки перпендикулярны оси образца, выполняется методами численного интегрирования (см. [1] и ссылки). Нами разработана программа расчета множителя поглощения для цилиндра в произвольном направлении выхода дифракционного пучка, задаваемого направляющими косинусами в лабораторной системе координат. Современные двумерные детекторы имеют большое число элементов разрешения, поэтому для экономии времени ЭВМ предложено выполнять вычисления не для каждого пикселя, а проводить интерполяцию по сетке с шагом 10-100 пикселей в направлении осей координат в плоскости детектора методом триангуляции поверхности распределения множителя поглощения. Зависимость интенсивность – угол дифракции $I(2\theta)$ рассчитывается по площади двумерного детектора так, чтобы при уточнении структур методом Ритфельда множитель поглощения уже не учитывался. Программа является частью математического обеспечения для обработки двумерных дифракционных картин от поликристаллических образцов [2].

1. Ida T. (2010), J. Appl. Cryst. 43, 1124.

2. С. Н. Сульянов, Н. Boysen, С. Paulmann, Ал. А. Русаков, Е. А. Сульянова, А. А. Гогин (в данном сборнике)

Гогин Андрей Александрович

119333, Москва, Ленинский пр. 59, Институт кристаллографии РАН

Тел.: 8(499)1356230; Факс: 8(499)1351011; E-mail: gogin@physics.msu.ru

О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ ПРИ СКОльзяЩЕЙ ДИФРАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕШЕТКЕ

И. Э. Голентус, А. Ю. Гаевский, В.Б. Молодкин

¹Институт металлофизики НАН Украины, Киев

Наноструктуры, имеющие периодический рельеф поверхности и называемые поверхностными решетками (*surface gratings*), находят все более широкое применение в микро- и оптоэлектронике, в элементах рентгеновской оптики. Магнитные планарные нанопровода с управляемой магнитной анизотропией могут найти применение в устройствах спинтроники. Оптимальным методом исследования поверхностных решеток является скользящее рассеяние рентгеновских лучей.

В данной работе теоретически исследована скользящая дифракция рентгеновского излучения в кристалле, на поверхности которого сформирована одномерная решетка микронного масштаба (рис.1). Показана возможность наблюдения в условиях полного внешнего отражения динамических эффектов, связанных с взаимодействием зеркально-отраженной, зеркально-дифрагированной волн, а также побочных гармоник, обусловленных дифракцией на поверхностной решетке. Исследована геометрия дисперсионных поверхностей и сходимость принятого приближения по числу учитываемых гармоник. Рассчитаны кривые дифракционного отражения при изменении угла падения, а также кривые сканирования по углу выхода для трехкристалльной схемы эксперимента.

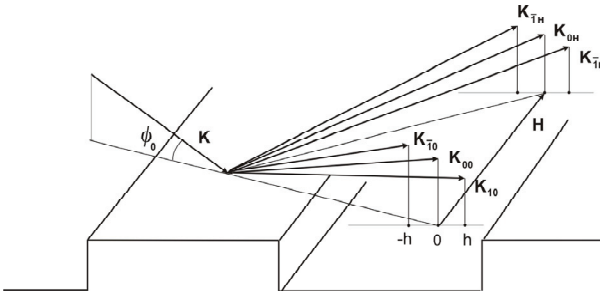


Рис.1. Геометрия волн при скользящем рассеянии на кристалле с когерентной поверхностной решеткой

Рассчитанные динамические эффекты актуальны при интерпретации экспериментальных данных по скользящей дифракции на поверхностных решетках.

Голентус Илья Эдуардович, инженер
03142, Киев, бульв. Вернадського, 36
Тел.: (38)0930293945; E-mail: transilv@mail.ru

МЕТОДИКА ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

С.В. Данилов, А.Д. Фофанов

Петрозаводский Государственный Университет, Петрозаводск

Известно, что физические свойства углеродных нанотрубок определяются их внутренним строением, которое достаточно трудно определить экспериментально посредством наблюдения (например, в электронный микроскоп). Для идентификации нанотрубок различных конфигураций (по длине, радиусу, степени хиральности и т.д.) возможно использовать сравнение дифракционных картин рассеяния рентгеновских лучей от экспериментальных образцов и от сгенерированных теоретических моделей с заранее известными параметрами. Поэтому необходимо наличие специализированных программ, формирующих модели нанотрубок различных конформаций.

Для моделирования идеальных нанотрубок (zig-zag, armchair) определенных радиуса и длины был разработан алгоритм простого сворачивания графеновой плоскости в круговой цилиндр. В работе представлен обобщенный алгоритм по формированию моделей однослойных нанотрубок различной степени хиральности, основанный на теоретических данных M.S.Dresselhaus [1] и др. Также представлен алгоритм получения координат атомов в идеальных многослойных нанотрубках типа «свиток». На основе данных алгоритмов разработаны программы на языке программирования Фортран, с использованием которых получены модели широкого спектра нанотрубок. Проведено исследование влияния конфигурации нанотрубок на картины рассеяния рентгеновских лучей и обсуждаются характерные, диагностические особенности интерференционной функции различных нанотрубок.

Примечание: Исследования проведены при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. № П801 от 24 мая 2010 г.

1. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Saito R., Physics of carbon nanotubes // Carbon, 1995, Vol. 33, No. 7, p. 883-891

Данилов Сергей Владимирович
185007, Петрозаводск, пер. Ругозерский 2-64
Тел.: (921)6241764; E-mail: sdanilov@psu.karelia.ru

**ПРОСТАЯ КУБИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
И ПОСЛЕДУЮЩИЕ МОДУЛИРОВАННЫЕ СВЕРХСТРУКТУРЫ
ПРИ СЖАТИИ ФОСФОРА И КАЛЬЦИЯ**

В.Ф. Дегтярева

Институт Физики твердого тела РАН, Черноголовка

Проведен анализ причин образования обнаруженных экспериментально кристаллических структур в кальции и фосфоре при высоком давлении [1,2]. Оба элемента переходят при сжатии в простую кубическую структуру, и при повышении давления более 1 мегабар принимают сложные модулированные структуры. Физические причины образования сложных структур в простых (sp) металлах рассматриваются в модели почти свободных электронов с привлечением концепции взаимодействия сферы Ферми и плоскостей зоны Бриллюэна-Джонса с применением программы BRIZ [3,4].

Структуры высокого давления P-IV и Ca-IV представляют сверхструктуры на основе искаженной простой кубической ячейки. При этом превращении экспериментально наблюдаются дополнительные рефлексы, Бриллюэновские плоскости которых лежат вблизи уровня Ферми, что приводит к понижению электронной зонной энергии и энергии кристаллической структуры в целом. Для фазы P-IV структура определена как несоразмерная модулированная с волновым вектором 0.267 [1]. Проведенное нами рассмотрение в модели сферы Ферми и зоны Бриллюэна-Джонса позволяет определить величину волнового вектора модуляции.

Для фазы Ca-IV кристаллическую структуру можно рассматривать как соразмерно модулированную сверхструктуру на основе простого куба. При выборе соответствующей зоны Бриллюэна-Джонса необходимо предположить, что в кальции при таких сжатиях (около 0.25 от объема при нормальном давлении) число валентных электронов увеличивается вследствие перекрытия энергетических уровней внешних электронов остова и валентной зоны.

1. Fujihisa H., Akahama Y., Kawamura H. et al., Phys. Rev. Lett. 2007, 98, 175501.
2. Fujihisa H., Nakamoto Y., Shimizu K. et al., Phys. Rev. Lett. 2008, 101, 095503.
3. Дегтярева В.Ф., УФН 2006, 176 (4), 383.
4. Degtyareva V.F., Smirnova I.S., Z. Kristallogr. 2007, 222, 718.

Дегтярева Валентина Феогниева, дфмн
142432, Черноголовка, ул.Академика Осипьяна, д.2
Тел.: 8(496)5221982; Факс: 8(496)5228160; E-mail:degtyar@issp.ac.ru

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДОВ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ И КУМУЛЯНТОВ ПРИ ВЫДЕЛЕНИИ И МОДЕЛИРОВАНИИ АНАЛИТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Р.З. Деянов¹⁾, А.А. Ищенко²⁾, А.И. Каменев¹⁾, А.М. Лебедев²⁾

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

²⁾ *Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова, Москва*

Построение фоновой линии при выделении и моделировании аналитических сигналов (АС) необходимо при обработке данных инструментального анализа, включая инверсионную вольтамперометрию (ИВ). Факторы, влияющие на линию фона, в общем случае носят случайный характер. Поэтому при моделировании используют функции, которые не вносят значимых искажений в параметры АС. Основными свойствами таких функций являются их гладкость и ограниченность кривизны. Разработанные нами алгоритмы и программное обеспечение основаны на методах регуляризации по А.Н. Тихонову и кумулянтов.

Экспериментальные исследования были выполнены на установке ХАН-2 («АЛТЕЙ-аналит», Санкт-Петербург) с трехэлектродной ячейкой. Формирование ртутно-графитовых электродов (с пленочным покрытием «островкового» типа толщиной от нескольких атомных слоев до нескольких нанометров) и измерения АС Cd(II), Pb(II) и Cu(II) проводили в оптимальных условиях ИВ. Сформированную линию фона вычитали из экспериментально полученного суммарного контура. Далее моделировали АС, используя составляющие ряда Эджворта и изменяя число кумулянтов, позволяющих учитывать асимметрию и эксцесс пиков, а также получать оптимальные оценки параметров сигналов.

Показано, что для моделирования сигналов Cd(II) и Pb(II), Cu(II) достаточно, соответственно, шести и четырех кумулянтов. Однако АС Cu(II) моделировался двумя парциальными пиками, оценки параметров которых позволяют высказать предположение о наличии разных степеней окисления для данного деполяризатора.

Предложенные подходы являются общими, что позволяет получать надежную информацию о параметрах других типов регистрируемых и моделируемых АС (см. <http://math-lab.ru>).

Деянов Рамиль Зинятуллович, с.н.с.

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, д. 1, стр. 52, 2-й учебный корпус, ВМК

Тел.: 8(495)9394663; E-mail: deyanov@math-lab.ru

ОБОБЩЕНИЕ НЕСТАНДАРТНОГО ПОДХОДА В ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ НА СЛУЧАЙ ДЕФОРМИРОВАННОГО КРИСТАЛЛА

А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев

*Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова,
Нальчик*

Строится обобщение нестандартной теории рентгеновской дифракции [1] в кристалле с учетом деформаций решетки. Вектор смещения атомных плоскостей вводится в модель поляризуемости кристалла аналогично теории Такаги. При этом применяется матричный вариант нестандартной теории, в котором решение строится в форме единого волнового поля непосредственно из уравнений Максвелла. Как и в случае идеального кристалла, проводится разложение амплитуд полей и векторных операторов согласно методу многих масштабов [2].

Обсуждаются различные варианты включения деформаций в формализм теории. Показано, что в зависимости от соотношения амплитуды деформации и структурных параметров, связанных с изменением деформации на некоторой характерной толщине, возможны различные представления решения. Такое различие обусловлено соотношением масштаба изменения деформации с пространственными масштабами, по которым проводится разложение решения для случая идеального кристалла. В частности, если масштаб изменения деформации происходит на длине порядка χ_n , то в результате получаются уравнения, обобщающие уравнения Такаги на случай произвольных геометрий дифракции, включая предельно асимметричные схемы и дифракцию в условиях ПВО.

Работа выполнена по гранту РФФИ 10-02-00023.

1. Дышеков А. А. // Поверхность. 2010. № 11. с. 1–10.
2. Kevorkian J.K., Cole J.D. Multiple scale and singular perturbation methods. Springer, Vol. 114. 1996. VIII. 648 p.

Дышеков Артур Альбекович, профессор
360004, Нальчик, ул. Чернышевского, д.173
Тел.: (8662)775190; Факс: (095)3379955; E-mail: rsa@kbsu.ru

ОБРАЗОВАНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В НЕМАТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРАХ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Л.В.Ельникова

Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва

Исследование геометрии и топологии практических всех типов полимерных фаз и пространственных конфигураций выявляет проблему редуцирования моделей с неабелевыми структурами к задачам, решаемым через абелевы топологические инварианты [1-2]. Актуальность данной деятельности связана с растущей необходимостью интерпретировать результаты рентгеноструктурных [3], позитронных [4], механических [5] и др. измерений, выявляющих зависимость поведения системы при фазовых превращениях от эволюции нетривиальных топологических особенностей, узлов и зацеплений и пр. дефектах в различных полимерных структурах. Математический аппарат суперструн, суперсимметрии и сверхпроводимости [6] на решетке, обладающий достаточной эвристической силой, успешно применяется в этом направлении [7]. В свою очередь мы представляем численное решение методом Монте Карло модели типа спинового стекла на примере нематических полимеров со шивками [3, 8], которые моделируются как узлы [9], порождаемые группой одномерных кос.

1. S. Nechaev and R Voituriez, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003) 43.
2. A. Grosberg and S. Nechaev, Advances in Polymer Science **106** (1993) 1.
3. E.P.Obratsov, A.S.Muresan, B.I.Ostrovskii et al, Phys.Rev.E **77**(2008)021706.
4. N. Mostafa Physica B **391** (2007) 161.
5. J.Berriot, H.Motes, F.Lequeux, D.Long, P.Sotta, Macromolec. **35** (2002) 9756
6. D.R.Nelson, Phys.Rev.Lett. **60** (1988) 1973.
7. M.N. Chernodub, M. Lundgren, and A. J. Niem, arXiv:1008.4552v1.
8. L. Petridis and E. M. Terentjev, J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006) 1.
9. M.E. Cates, Phys. Rev. B. **45** (1992) 12415.

Ельникова Лилия Вячеславовна, н.с.

117218, Москва, Большая Черемушкинская, д.25

Тел.: 8(499)1236397; Факс: 8(499)1270833; E-mail: elnikova@itep.ru

СИНХРОТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНОГО КРИСТАЛЛА КТlОРО₄

М.Р. Зарипов, В.В. Соболев, В.Вал. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Соединение КТlОРО₄ весьма перспективно как нелинейный оптический материал. В работе [1] измерены синхротронные спектры отражения в области 3 – 17 эВ монокристаллов, вырезанных в плоскости ХZ, для поляризаций $\mathbf{E} \parallel \mathbf{X}$ и $\mathbf{E} \parallel \mathbf{Z}$. Общепринято при рассмотрении электронной структуры и оптических свойств материала анализировать спектры обширного комплекса фундаментальных оптических функций: мнимую (ϵ_2) и реальную (ϵ_1) части диэлектрической проницаемости; коэффициенты отражения (R) и поглощения (α); показатели преломления (n) и поглощения (k); реальные ($Re\epsilon^{-1}$, $Re(1+\epsilon)^{-1}$) и мнимые ($Im\epsilon^{-1}$, $Im(1+\epsilon)^{-1}$) части объемных и поверхностных характеристических потерь энергий электронов; оптическую проводимость (σ) и объединенную плотность состояний (J), пропорциональную $E^2\epsilon_2$ при постоянстве сил осцилляторов переходов; эффективное количество электронов ($n_{eff}(E)$), участвующих в переходах до заданной энергии E , и эффективную диэлектрическую проницаемость (ϵ_{eff}). В настоящем сообщении впервые определены в области 1 – 17 эВ спектры двух комплексов экспериментальных оптических функций кристалла КТlОРО₄ для поляризаций $\mathbf{E} \parallel \mathbf{X}$ и $\mathbf{E} \parallel \mathbf{Z}$. Расчеты выполнены на основе экспериментальных отражений [1] с использованием пакетов компьютерных программ [2]. Поляризованные спектры $R(E)$ КТlОРО₄ содержат много пиков и максимумов, аналоги которых наблюдаются и в спектрах других оптических функций. Установлены основные особенности поляризованных спектров комплексов оптических функций кристалла КТlОРО₄. Все их структуры обусловлены прямыми междузонными переходами и метастабильными экситонами.

1. Довгий Я.О., Китык И.В., Дьяков В.А. ФТТ, 31, 9 (1989).

2. Sobolev V.Val., Sobolev V.V. Semiconductors and Semimetals 79, 201 (2004).

Зарипов Марат Рафисович
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

СПЕКТРЫ МРН ДЛЯ ЛОКАЛЬНО-РЕГУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ СУПЕРНУКЛЕОСОМНЫХ СТРУКТУР ХРОМАТИНА ХРОМОСОМНОГО РАЗМЕРА

А.В.Илатовский^{1,2)}, Д.В.Лебедев¹⁾, М.В.Филатов¹⁾, М.Г.Петухов^{1,2)}, В.В.Исаев-Иванов¹⁾

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

²⁾ *Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург*

Геном эукариот представляет собой плотно упакованный комплекс днднк и белков — хроматин, структурными элементами которого являются нуклеосомы. Трехмерная структура нуклеосомы (белковый кор, вокруг которого днднк образует ~1.7 витка суперспирали) с полноатомным разрешением получена методом рентгеноструктурного анализа. Детали организации структур более высокого порядка к настоящему моменту неизвестны, в литературе обсуждается ряд регулярных моделей нити хроматина, имеющей диаметр ~30 нм, однако, анализ последних данных говорит в пользу нерегулярной упаковки на основе 10-нм нити.

Нами получены данные по малоугловому рассеянию нейтронов (МРН) на целых ядрах и разработана модель супернуклеосомной структуры хроматина хромосомного размера (~10⁶ нуклеосом) для расчетов спектров МРН [1]. Для проверки гипотезы о регулярности нити хроматина было построено несколько локально-регулярных моделей и рассчитаны спектры МРН. Оказалось, что спектры для локально-регулярных моделей (по сравнению с нерегулярными) имеют характерные отличительные черты, отсутствующие у экспериментальных спектров, которые лучше описываются кривыми, полученными для нерегулярных моделей.

1. Ilatovskiy *et al.* Modeling and SANS Spectra of Chromatin Supernucleosomal Structures at Genome Scale. *J Appl Phys*, in press.

Илатовский Андрей Владимирович
188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ОМРБ ПИЯФ РАН
Тел.: (812)2973141; Факс: (81371)32303; E-mail: andreyi@omrb.pnpi.spb.ru

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ СПЕКТРОАНАЛИЗАТОР: МЕТОД ГЛОБАЛЬНОЙ МИНИМИЗАЦИИ В ВОССТАНОВЛЕНИИ СПЕКТРА ПАДАЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.К. Кавеев¹⁾, Р.З. Деянов²⁾

¹⁾ ЗАО "Тидекс", Санкт-Петербург

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

Анализ пропускания системы параллельных двулучепреломляющих пластин позволяет получать различные оптические элементы, обладающие практически значимыми свойствами для приложений, связанных с поляризационной оптикой. Расчет таких систем осуществляется с помощью формализма Пуанкаре и матриц Джонса. В работе предложено использовать подобную систему в качестве анализатора спектра падающего излучения. Данное применение актуально, например, в терагерцовой спектроскопии, где существует потребность в простых спектроанализаторах, помимо имеющихся достаточно сложных и дорогостоящих приборов [1].

Восстановление спектра падающего на рассматриваемый прибор излучения представляет собой классическую спектроскопическую задачу, связанную с

решением уравнения Фредгольма 1-го рода $\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} K(\lambda, \gamma) I(\lambda) d\lambda = F(\gamma)$, где λ - длина

волны, γ - обобщенная координата. Ставилась задача восстановить функцию $I(\lambda)$, представляющую собой спектральное распределение падающего света. После дискретизации уравнения получают плотно заполненные квадратные матрицы (1501*1501), плохо обусловленные ($\text{cond}(A)=10^{12}$) и неустойчивые по погрешностям в правых частях. Решения полученные методами SVD, регуляризации, итерационными (Зейделя, Якоби, Крейга, Лебедева) не отвечали физическому смыслу, хотя и давали значения $Rfactor$ близкие к нулю. Физически обоснованные решения (острые пики) были получены после параметризации пиков функциями, моделирующими асимметричный пик, и поиска введенных параметров методом глобальной минимизации [2] функционала невязки: $Rfactor = \|Ax - b\| / \|b\|$. Заметим, что методы локального поиска минимума также не приводили к успеху из-за многоэкстремальности задачи. Условия задачи и ее решения можно посмотреть/скачать на сайте <http://math-lab.ru/>

1. Y.-S.Lee. Principles of terahertz science and technology. Springer, 2009, Ch.3

2. Деянов Р.З., Щедрин Б.М. Алгоритм последовательного спуска по системе локальных минимумов. Прикладная математика и информатика № 30, М.: Изд-во факультета ВМиК МГУ, с.46-54, 2008.

Кавеев Андрей Камильевич, н.с.

194292, Санкт-Петербург, ул. Домостроительная, д. 16

тел.: 8(812)3318702; E-mail: andreykaveev@tydex.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ СЕЛЕНИДА ЦИНКА

А.И. Калугин, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

В этой работе мы представляем детальные теоретические исследования электронной структуры кристаллов ZnSe, в том числе энергетических зон, спектров плотностей занятых и свободных состояний, диэлектрической проницаемости, а также особенности локализации оптических переходов в зоне Бриллюэна (ЗБ). Теоретические расчеты зон выполнены линейным методом присоединенных плоских волн (LAPW) с помощью пакета программ Wien2k [1]. Максимум ВВЗ кристаллов находится в точке Г. Ширина ВВЗ минимальна для направлений ГЛ и ГХ: $\Delta E_v(\Gamma L) \approx 1.06$ eV, $\Delta E_v(\Gamma X) \approx 2.25$ eV. Полученные величины $\Delta E_v(\Gamma L)$ и $\Delta E_v(\Gamma X)$ и их отношение (2.1) совпадают с ранее известными эмпирическими данными. В некоторых теоретических работах спектры $\varepsilon_2(E)$, рассчитанные по всему объему зоны Бриллюэна (ЗБ), представлены интегральными кривыми. При этом, как правило, утверждается самая простейшая модель локализации максимумов за счет переходов в точках направлений ГЛ, ГХ и в точках ограниченного плато в плоскости ГЛУХ ЗБ. Нами установлены следующие основные особенности локализации оптических переходов: весьма существенный вклад в интегральный спектр $\varepsilon_2(E)$ дают междузонные переходы в объеме ЗБ, а не только в точках симметричных направлений; локализация переходов, формирующих основные полосы спектра ε_2 , значительно отличается от общепринятой модели: самая интенсивная полоса с $E = 5.3$ эВ формируется переходами в большом объеме ЗБ, а не в плоскости ГЛУХ ЗБ.

1. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz I. WIEN2k. An augmented plane wave+local orbitals program for calculating crystal properties (K. Schwarz. Techn. Univ. Wien, Austria). 2001. ISBN 3-9501031-1-2.

Калугин Алексей Игоревич
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500-587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ «ЗАПРЕЩЕННЫХ» ОТРАЖЕНИЙ В ДИГИДРОФOSFATE РУБИДИЯ С УЧЕТОМ ФЛУКТУАЦИЙ ПОЛОЖЕНИЙ АТОМОВ ВОДОРОДА

К.А.Кедало¹⁾, Г.Т.Мулякко¹⁾, Е.Н.Овчинникова¹⁾

А.П.Орешко¹⁾, В.Е.Дмитриенко²⁾

¹⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН им. А.В.Шубникова, Москва*

В работе рассматриваются «запрещенные» отражения, которые могут возникать при резонансной дифракции синхротронного излучения в кристаллах RbH_2PO_4 (RDP) при энергии падающего излучения, близкой к К-краю рубидия. При температуре от 147 К до 450 К кристаллы являются тетрагональными, имеют симметрию $\bar{I}42d$, размеры элементарной ячейки $a=7.607(1)$ А и $c = 7.299(2)$. При 147 К происходит переход из параэлектрической в сегнетоэлектрическую фазу с симметрией $Fdd2$. Нейтронные исследования показали, что в тетрагональной (разупорядоченной) фазе каждый атом водорода с равной вероятностью находится в одной из двух позиций, между которыми происходят перескоки.

В высокотемпературной фазе запрещены отражения типов hhl , $2h+l=4n+2$. Как показано в работе [1] погасание может быть снято только с учетом диполь-квадрупольного, термоиндуцированного вкладов в резонансный атомный фактор, а также вклада от флуктуаций положений атомов водорода. В работе разрабатывается метод расчета структурной амплитуды «запрещенных» отражений, основанный на моделировании мгновенных положений атомов водорода. Показано, что различным конфигурациям, которые образуют атомы водорода в элементарной ячейке, соответствуют разные значения резонансной энергии. Проведено численное моделирование интенсивности, энергетического спектра и азимутальной зависимости «запрещенного» отражения 002 .

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-02-01293 и 10-02-00768.

1. Э.Х. Мухамеджанов, М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, Е.Н. Овчинникова, Е.В. Трошков, В.Е. Дмитриенко. Кристаллография, 2010, том 55, № 2, с. 187–196

Кедало Ксения Андреевна
119991 ГСП Москва, Ленинские Горы, МГУ, физический факультет
Тел.: 8(495)9391226; Факс: 8(495)9328820; E-mail: ksenia.kedalo@gmail.com

КОМБИНИРОВАННАЯ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА МИКРОДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ ПОСЛЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Е.Н.Кисловский¹⁾, В.Б.Молодкин¹⁾, С.И.Олиховский¹⁾, Е.Г.Лень¹⁾, Б.В.Шелудченко¹⁾, С.В.Лизунова¹⁾, Т.П.Владимирова¹⁾, Е.В.Кочелаб¹⁾, О.В.Решетник¹⁾, В.В.Довганюк²⁾, И.М.Фодчук²⁾, Т.В.Литвинчук²⁾, В.П.Кладько³⁾

¹⁾ *Институт металлофизики НАНУ, Киев, Украина*

²⁾ *Черновицкий национальный университет, Черновцы, Украина*

³⁾ *Институт физики полупроводников НАНУ, Киев, Украина*

Электронное облучение открывает возможность целенаправленного влияния на структурные изменения и связанные с ними механические, электрические, оптические и другие физические свойства разрабатываемых новых функциональных материалов.

В работе методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии проведена количественная многопараметрическая диагностика сложной дефектной структуры в кристаллах кремния, выращенных методом Чохральского и облученных разными дозами высокоэнергетических электронов (18 МэВ), с использованием аналитических формул [1, 2] статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей в неидеальных кристаллах со случайно распределенными дефектами нескольких типов определены концентрации и средние размеры дислокационных петель и преципитатов кислорода в исследуемых образцах кремния.

Количественная информация о взаимодействии точечных и микродефектов обеспечивает более корректный анализ влияния высокоэнергетического электронного облучения на несовершенства монокристаллов кремния и других полупроводниковых структур, в частности, позволяет определить роль ростовых дефектов в превращениях первичных и вторичных радиационных дефектов.

1. V.B.Molodkin, S.I.Olikhovskii, E.N.Kislovskii, et al., Phys. Rev. B 78, 224109 (2008).

2. V.B.Molodkin, S.I.Olikhovskii, E.G.Len, et al., phys. stat. sol.(a) 206, 1761 (2009).

ВЛИЯНИЕ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА ИСТОЧНИКА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ КОНЦЕНТРАТОРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

И.В. Кожевников¹⁾, И.В. Якимчук^{1),2)}, В.Е. Асадчиков¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

²⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

Эллиптические концентраторы рентгеновского излучения являются оптическими элементами, позволяющими увеличивать интенсивность пучка и уменьшать его диаметр. Для эффективного решения этих задач необходимо оптимизировать ряд параметров концентратора исходя из поставленных условий. Ясно, что для каждого конкретного случая можно искать оптимальный вариант некоторым численным итерационным путем. Мы же ставили перед собой задачу оптимизации концентратора для общего случая в наиболее параметризованном виде.

В настоящей работе рассматривается лишь вопрос влияния размеров источника рентгеновского излучения на эффективность эллиптического концентратора. Предложено несколько способов поиска оптимальных параметров концентратора, а также приближенный метод расчета распределения интенсивности в фокальной плоскости, в зависимости от заданного размера источника. Справедливость предлагаемых выражений подтверждалась сопоставлением результатов вычислений с аналогичными результатами, полученными методом прогонки лучей.

В расчетах обнаруживается интересное поведение коэффициента транспортировки излучения по мощности в зависимости от размера источника. Значение этого коэффициента может возрасти при увеличении размеров источника. В работе обоснована принципиальная возможность такого эффекта.

Кожевников Игорь Викторович
119333, Москва, Ленинский пр., д. 59
Тел.: 8(499)1355100; Факс: 8(499)1355100; E-mail: ivk@crys.ras.ru

ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТА В ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛАХ КЛАССОВ 222 И 2

А.Ф. Константинова, Т.Г. Головина, Е.А. Евдищенко, Б.В. Набатов

Институт кристаллографии РАН, Москва

Низкосимметричные кристаллы исследованы довольно слабо, и поэтому они практически не используются. Нами проведены исследования оптически активных поглощающих кристаллов классов 222 и 2 для случая, когда каждая из оптических осей поглощающего кристалла расщепляется на две круговые. Полученные результаты приведены ниже для одних и тех же главных значений показателей преломления и поглощения, параметров оптической активности: $N_1 = 1.540 + i \cdot 10^{-3}$, $N_2 = 1.567 + i \cdot 1.5 \cdot 10^{-3}$, $N_3 = 1.572 + i \cdot 2 \cdot 10^{-3}$; $\alpha_{11} = 7.4 \cdot 10^{-5} + i \cdot 2.5 \cdot 10^{-6}$, $\alpha_{22} = 3.04 \cdot 10^{-4} + i \cdot 3.5 \cdot 10^{-6}$, $\alpha_{33} = -3.76 \cdot 10^{-4} + i \cdot 3 \cdot 10^{-6}$. Для кристаллов класса 2: $n_{12} = 0.4 + i \cdot 10^{-4}$, $\alpha_{12} = -6.91 \cdot 10^{-5} + i \cdot 10^{-6}$. Расчеты для моноклинного кристалла проведены для двух случаев: I – ось симметрии 2 параллельна направлению, соответствующему наибольшему показателю преломления N_g , и II – ось 2 ортогональна направлению N_g .



1-й столбец: в активных кристаллах класса 222 и 2 (в случае I) $\chi_{t \max}$ одинаковы вдоль обеих оптических осей, а для класса 2 в случае II для обеих оптических осей $\chi_{t \max}$ могут различаться как по величине, так и по знаку.

2-й столбец: в активных поглощающих только в ромбическом кристалле $\chi_{t \max}$ одинаковы, в моноклинных их значения различны.

3-й столбец: в активных поглощающих кристаллах во всех рассматриваемых случаях эллиптичности собственных волн различны, а в прозрачных кристаллах класса 222 – одинаковы вдоль обеих оптических осей.

Константинова Алиса Федоровна, д.ф.-м.н.

119333, Москва, Ленинский пр., д. 59.

Тел.: 8(499)1351300; Факс: 8(499)1351011; E-mail: afkonst@ns.crys.ras.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ ЗОННОЙ ПЛАСТИНКОЙ В НЕКОГЕРЕНТНОМ ЖЕСТКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ИЗЛУЧЕНИИ

В.В. Котляр, А.Г. Налимов, Соيفер В.А.

Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН

Использование мягкого и жесткого рентгеновского излучения в оптических системах позволяет получать высокое разрешение в задачах микроскопии. Короткая длина волны рентгеновского излучения по сравнению с видимым светом накладывает более жесткие условия на расчет и изготовление оптики – линз Френеля, зонных пластинок, дифракционных решеток. Зонные пластинки (ЗП) являются одним из самых простых элементов для фокусирования когерентного и частично когерентного рентгеновского излучения. Теория их расчета известна давно, однако интерес представляет так же и моделирование распространения света через рассчитанную зонную пластинку.

В докладе приведены результаты моделирования формирования изображения в жестком рентгеновском излучении с помощью ранее изготовленной зонной пластинки (ЗП) для длины волны 0,229 нм [1]. Распространение излучения в пространстве моделировалось с помощью интеграла Рэлея-Зоммерфельда, а в ЗП – коммерческой программой BeamProp. Расчет производился на кластере из 800 ядер процессоров Intel Xeon 5593 2,93 ГГц. Было показано, что при формировании изображения ЗП с малой эффективностью (около 4%) необходимо сдвинуть объект с оптической оси и освещать его сходящимся пучком. Тогда нулевой порядок дифракции на ЗП не мешает формированию изображения. Показано также, что дифракционная решетка с периодом 100 нм разрешается с высоким контрастом ЗП с крайней зоной равной 50 нм, что согласуется с экспериментальными данными в работе [2].

1. **Котляр, В.В.** Зонная пластинка на мембране для жесткого рентгеновского излучения / В.В. Котляр В.В., М.И. Шанина, В.А. Соифер, О'Фаолайн Л., А.Г. Налимов // Компьютерная оптика, 2011. – Т.35. – N. 1. – С. 36-41.
2. **Hofsten, O.** Sub-25-nm laboratory X-ray microscopy using a compound Fresnel zone plate / O. Hofsten, M. Bertilson, J. Reinspach, A. Holmberg [and oth.] // Opt. Letters, 2009. – Vol. 34. – No. 17. – PP. 2631-2633.

Котляр Виктор Викторович, д.ф.-м.н., профессор
443001, Самара, ул. Молодогвардейская, 151
Тел. (846)3325787; E-mail: kotlyar@smr.ru

СИНХРОТРОННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ОКСИДА ЦИНКА

М.В. Кузнецова, В.Вал. Соболев, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

Оксид цинка – один из самых сложных соединений группы II-IV [1]. В последние годы его оптические свойства исследуются заново и детальнее, имея в виду его большие перспективы применений в оптоэлектронике. Наиболее детальную информацию об оптических свойствах получают после решения двух фундаментальных задач оптической спектроскопии. Первая из них состоит в получении комплекса оптических функций в широкой области энергии: коэффициентов отражения $R(E)$ и поглощения $\alpha(E)$; мнимой $\varepsilon_2(E)$ и реальной $\varepsilon_1(E)$ части диэлектрической проницаемости $\varepsilon(E)$ и комбинированной (объединенной) плотности состояний $J(E)$, равной $E^2\varepsilon_2$ с точностью до универсального множителя при постоянной силе осцилляторов всех переходов; мнимых $(-Im\varepsilon^{-1})$, $(-Im(1+\varepsilon)^{-1})$ и др. Эта задача обычно решается на основе измеренного $R(E)$ с применением компьютерных программ. Вторая задача оптической спектроскопии состоит в разложении спектров $\varepsilon_2(E)$ и $-Im\varepsilon^{-1}$ на элементарные компоненты и определении основных параметров каждой компоненты. Обе задачи оптической спектроскопии решены нами для кристалла оксида цинка на основе синхротронных экспериментальных спектров отражения при 100 К в области 1-30 эВ [2], применяя методы расчетов работы [3]. Установлены основные особенности поляризованных спектров полных комплексов оптических функций, а также параметры полос разложений спектров $\varepsilon_2(E)$ и $-Im\varepsilon^{-1}$.

1. Соболев В.В. Зоны и экситоны соединений группы II-IV.(Кишинев: Штиинца), 255 с.(1980).
2. Freeouf J.L. Phys.Rev.B. 7, 3810 (1973).
3. Соболев В.В., Немощкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников. (Киев: Наук. думка). 423 с. (1988).

Кузнецова Мария Владимировна
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

СИНХРОТРОННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ХЛОРИДА РУБИДИЯ

Ю.А. Култышева, В.Вал. Соболев, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

Хлорид рубидия кристаллизуется в гранецентрированной кубической решетке типа NaCl. Для кристаллов группы A^1B^7 характерны весьма сложные линейчатые оптические спектры с хорошо выраженными особенностями, теоретически предсказанными для свободных и метастабильных экситонов [1]. Они широко применяются, как матрицы, для изучения примесных состояний, в том числе для сцинтилляторов ядерных излучений. Среди них выделяются кристалл RbCl, как сравнительно слабо изученный. Экспериментальный спектр отражения RbCl в области 6-30 эВ содержит большое количество острых пиков и широких полос [2]. Общепринято, что наиболее полная и детальная информация об оптических свойствах соединения содержат в комплексе фундаментальных оптических функций в широкой области энергии: коэффициенты отражения $R(E)$ и поглощения $\alpha(E)$; показатели поглощения $k(E)$ и преломления $n(E)$; мнимая (ϵ_2) и реальная (ϵ_1) части диэлектрической проницаемости ϵ ; функции $-\text{Im}1/\epsilon$, $-\text{Im}1/1+\epsilon$, $n_{\text{eff}}(E)$ и др. На основе экспериментального спектра $R(E)$ кристалла RbCl в области 1-30 эВ [2] рассчитали спектры полного комплекса оптических функций, установили их основные особенности, точные энергии полос переходов (по спектрам $\epsilon_2(E)$, $\alpha(E)$), т.е. решена первая фундаментальная задача оптической спектроскопии для кристалла RbCl, получена обширная база для анализа теоретических расчётов, электронной структуры RbCl и решения второй фундаментальной задачи оптической спектроскопии: нахождение спектра элементарных полос переходов и основных параметров компонент переходов: энергии максимумов и интенсивности переходов.

1. Соболев В.В. Экситоны и зоны щёлочно-галогидных кристаллов. (Кишинёв: Штиинца), 1982. 302 с.

2. Peinmann C.J., Skibovskii M. Preprint DESY SR-71/3, Hamburg: DESY, 1971. 20 pp.

НОВЫЕ ЭЛЕКТРОННО-ДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

М.Г.Кязумов

Институт Физики НАН Азербайджана, Баку

Разработаны следующие новые электронно- дифракционные методы:

Во время съемки, монокристаллическая пленка с моноклинной симметрией вращается вокруг одной из координатных осей атомной или обратной решетки, которая перпендикулярно расположена к падающему электронному лучу. Вращение вокруг каждой из этих осей отличается не только по схеме получения электронограмм, а также по формулам их расшифровки. Поэтому каждой из них представляется как отдельный метод.

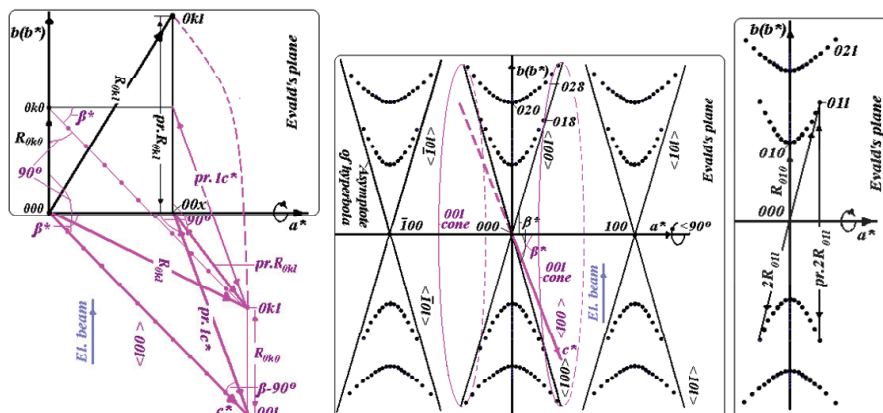


Рис.1.Схема получения электронограмм от моноклинного кристалла вращающегося вокруг оси a^* обратной решетки. Черные линии и точки(рефлексы) находятся в плоскости Эвальда.

При вращении вокруг оси a^* обратной решетки узловые ряды $h0$ ($h=const., l$ -меняется) рисуют поверхности коаксиальных конусов, а узловые ряды hk ($h, k = const., k \neq 0, l$ -меняется) рисуют поверхности коаксиальных гиперолоидов, центры которых расположены на оси a^* обратной решетки в точках ha^* . При перпендикулярном падении электронного луча к оси a^* пересечением гиперолоидов с плоскостью Эвальда получают гиперболы, пересечением с плоскостью Эвальда конусов получают асимпты этих гипербол.

Кязумов Махмуд Гашим оглы

Азербайджан, Аз - 1143, Баку, пр.Г.Джавида,33.

Тел: 994(12)5200679; Факс: 994(12)4470456; E-mail: elmira@ physics.ab.az

ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НЕКОТОРЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕМЕЙСТВА TAs

А.А. Лаврентьев, И.Я. Никифоров, П.Н. Шкумат, Б.Б. Кулагин, Б.В. Габрельян

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону

Методами рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии исследована электронно-энергетическая структура соединений Tl_3AsS_3 , Tl_3AsSe_3 , Tl_3AsS_4 и Tl_3PS_4 . В работе также проведены *ab initio* квантово-механические расчеты плотностей электронных состояний (DOS) с помощью программ FEFF82 и Wien2k. Для соединений Tl_3AsS_3 и Tl_3AsSe_3 установлен стереоэффект ближайшего окружения As атомами S (Se), заключающийся в том, что появление запрещенной полосы в этих соединениях связано с изменением высоты тригональной пирамиды [As S(Se)₃]. Получено хорошее согласие формы и элементов тонкой структуры рентгеновских и рентгеноэлектронных спектров с формой теоретических DOS.

Лаврентьев Анатолий Александрович, профессор
344000, Ростов-на-Дону, пл.Гагарина, д.1
Тел.: 8(928)6014539; Факс: 8(863)2327953; E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО КИНО

В.В. Лизунов¹⁾, В.Б. Молодкин¹⁾, М.В. Ковальчук²⁾, А.П. Шпак¹⁾, В.Л. Носик²⁾,
И.М. Карнаухов³⁾, А.Е. Благов²⁾, С.В. Лизунова¹⁾

¹⁾ *Институт металлофизики НАН Украины, Киев*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

³⁾ *ННЦ "Харьковский физико-технический институт", Харьков*

На основе открытого в [1] явления зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на динамическую дифракционную картину, обусловленного эффектами многократности диффузного рассеяния (стоячим характером диффузных волн), создан принципиально новый экспрессный подход в диагностике характеристик дефектов в монокристаллических материалах и изделиях нанотехнологий, который отличается от традиционного как теоретическими, так экспериментальными и методическими основами и, вследствие этого, принципиально новыми функциональными возможностями, в частности, для рентгеновского и нейтронного кино. В новом подходе вместо традиционных предлагаются измерения принципиально новых структурночувствительных распределений дифрагированной динамически интенсивности как функции параметров, характеризующих условия динамической дифракции (энергодисперсионные измерения, рентгеновские и нейтронные ультразвуковые исследования и др.). Это позволило осуществить экспериментальное и соответствующее теоретическое интегрирование по пространству обратной решетки интенсивностей рассеяния и в результате существенно повысить чувствительность, экспрессность и простоту диагностики, что и обеспечивает возможность реализации рентгеновского и нейтронного кино. При этом неизбежная за счет интегрирования по обратному пространству потеря информативности и чувствительности к характеристикам дефектов компенсируется с лихвой использованием этих новых распределений.

1. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak et al., Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials (MOMENTUM PRESS, LLC, New Jersey, 2009), p. 391-434.

Лизунов Вячеслав Вячеславович, м.н.с.
03680, Украина, Киев, бульв. Академика Вернадского, 36
Тел.: +(38044)4240530; Факс: +(38044)4242561; E-mail: lizunov@imp.kiev.ua

ЭФФЕКТ ИЗМЕНЕНИЯ ИЗБИРАТЕЛЬНОСТИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ К ДЕФЕКТАМ РАЗЛИЧНОГО ТИПА В ГЕТЕРОСИСТЕМАХ ЗА СЧЕТ ВАРИАЦИЙ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ

С.В.Лизунова¹⁾, В.Б. Молодкин¹⁾, В.Л. Носик²⁾, С.И. Олиховский¹⁾, Е.Н. Кисловский¹⁾,
Е.Г. Лень¹⁾, Е.С. Скакунова¹⁾, В.В. Молодкин¹⁾

¹⁾ *Институт металлофизики НАН Украины, Киев*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

На основе построенных авторами моделей динамической дифракции проведен сравнительный анализ информативности диагностики дефектной структуры многослойных гетеросистем в геометриях по Лауэ и по Брэггу. Установлена возможность управления изменением избирательности чувствительности к дефектам различного типа при изменении условий дифракции, в частности, при изменении геометрии дифракции (по Лауэ или по Брэггу) для многослойных гетеросистем с дефектами. Показано, что обнаруженная авторами уникальная структурная чувствительность зависимостей от условий дифракции обусловлена блоховским характером волновых полей, который приводит к различным для дефектов разного типа ориентационным зависимостям (от отклонений волнового вектора от узлов обратной решетки) как преломления, так и поглощения стоячих брэгговских и диффузных волновых полей в кристаллических слоях гетеросистем в отличие от кинематической теории, в которой эти величины остаются константами. Это и обуславливает явление зависимости от условий дифракции за счет ориентационного множителя характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния и позволяет существенно повысить информативность неразрушающей послышной диагностики многослойных наносистем путем целенаправленного управления изменением избирательности чувствительности к дефектам различного типа при изменении условий дифракции в рамках комбинированной диффузодинамической дифрактометрии.

Лизунова Светлана Вячеславовна
03680, Украина, Киев, бульв. Академика Вернадского, 36
Тел.: (38044)4240530; Факс:(38044)4242561; E-mail: svetlana.lizunova@gmail.com

МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ РЯДА УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Д. В. Логинов, Л. А. Алешина, А. Д. Фофанов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск

Рентгенограммы аморфных, наноструктурных и нанопористых углеродных материалов были получены на дифрактометре Дрон-6 в $Mo K_{\alpha}$ излучении.

Для образцов, дающих картины рассеяния, характерные для некристаллических материалов, методом Уоррена-Финбака были рассчитаны характеристики ближнего порядка. Показано, что области ближнего упорядочения в исследуемых образцах по своей организации отличаются от соответствующих областей гексагонального графита и друг от друга распределением атомов по координационным сферам при сохранении значений радиусов близкими к средневесовым значениям для гексагонального графита.

Методом компьютерного моделирования были построены наиболее вероятные модели расположения атомов в областях ближнего упорядочения шунгита, стеклоуглерода, антрацита, а также нанопористых углеродных материалов, полученных из карбидов кремния и титана.

Модели расположения атомов в области ближнего упорядочения были построены на основе представлений Уоррена о турбостратном искажении пакетов гексагональных слоев углерода.

Идея совершенствования модели Уоррена состояла в том, чтобы, варьируя основные параметры: число атомов в сетке, дисперсии случайных смещений атомов из положения равновесия, углы и дисперсии углов разворота сеток, радиусы изгиба сеток, а также, вводя вакансии, добиться совпадения экспериментальных и рассчитанных для моделей кривых $H(s)$.

Критериями достоверности предложенных моделей служили совпадения кривых распределения интерференционных функций, функций радиального распределения и координационных чисел, рассчитанных для моделей с соответствующими экспериментальными данными.

Логинов Дмитрий Владимирович, ст. преподаватель
185910, Петрозаводск, пр. Ленина, 33
Тел.: (8142)719654; E-mail: logindm@mail.ru

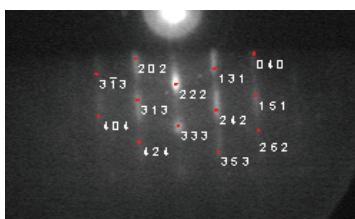
**ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ ЭЛЕКТРОНОГРАММ ДЛЯ УСТАНОВКИ
МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ**

В.И. Михайлов, Л.Е. Поляк, Е.В. Ракова, А.В. Буташин, А.Э. Муслимов,
В.М. Каневский, В.Б. Кварталов.

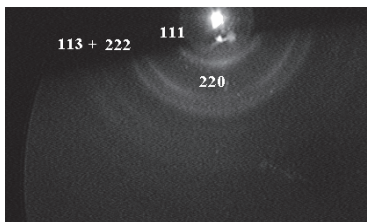
Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, Москва

Разработана программа для анализа картин дифракции быстрых электронов на отражение, наблюдаемых в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. В программе рассчитываются эталонные электронограммы для заданных кристаллических структур, ориентацию которых относительно пучка можно изменять, подбирая наилучшее совпадение с реальным изображением с учётом геометрических размеров камеры и энергии электронов. Программа реализована в среде Delphi (язык Pascal) и выполняет следующие функции: просмотр и анализ, каталогизация и моделирование изображений.

Программа использована для анализа электронограмм от нарастающих кристаллических плёнок в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии CdTe на (0001) Al₂O₃ подложках с различным состоянием поверхности [1]. Установлено, что эпитаксиальный рост имел место только на Al₂O₃ подложках, подвергнутых отжигу на воздухе при T ≥ 1000°C и содержащих на поверхности систему гладких террас и ступеней. При этом образующие плёнку кристаллиты теллурида кадмия ориентированы плоскостью (111) параллельно подложке с соблюдением следующих соотношений: (111) [1 $\bar{1}$ 0]CdTe || (0001) [11 $\bar{2}$ 0]Al₂O₃ (рис. а). На поверхности подложек, прошедших лишь химико-механическую полировку, а также отожженных в вакууме, росли неориентированные поликристаллические плёнки теллурида кадмия (рис. б).



а



б

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, ГК №02.740.11.0218.

1. В. И. Михайлов, А. В. Буташин, В. М. Каневский и др. // Поверхность. 2011, № 6.

Михайлов Владимир Иванович, с.н.с.

119333, Москва, Ленинский просп., д.59

Тел.: 8(495)1354200; Факс: 8(495)1351011; E-mail: vmikh@ns.crys.ras.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНДИФРАКЦИОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СУБСТРУКТУРЫ ПОРОШКОВ NbC

А.Б. Михайлова, В.П. Сиротинкин, Ю.В. Благовещенский, В.Ф. Шамрай

*Учреждение РАН Институт металлургии и материаловедения
им. А.А. Байкова РАН, г. Москва*

Различными рентгеновскими методами: по интегральной ширине рентгеновских линий (Вильямсона -Холла), методом гармонического анализа формы рентгеновских линий (Уоррена-Авербаха) и полнопрофильного анализа (метод Ритвельда) исследована субструктура порошков NbC. Используются программные пакеты PDXL (Rigaku), WinFit и MAUD. Исследованы порошки NbC, полученные карботермическим восстановительным синтезом, и порошки карбида ниобия, изготовленные по технологии плазмохимического синтеза. Эксперимент выполнен на дифрактометре Ultima 4 (CuK α излучение): по методу Брэгга-Брентано с графитовым монохроматором и сцинтилляционным детектором, и с использованием высокоскоростного детектора D/teX.

Основной вклад в уширение рентгеновских профилей обусловлен размером ОКР. Полученные различными способами значения ОКР находились в интервале 80-140 Å, то есть были ~ в 2 раза меньше размера частиц, рассчитанных из величины удельной поверхности (210 Å). Наименьшие значения ОКР были получены в методе гармонического анализа. Воспроизводимость дифракционных профилей с помощью функции псевдо- Фойгта в эксперименте выполненном с использованием счетчика D/teX оказалась несколько лучше чем при съемке с сцинтилляционным счетчиком.

Обсуждаются возможные систематические ошибки при оценке параметров субструктуры различными методами: корректность подведения фона, выбор эталонов и аппроксимирующих функций для описания формы дифракционных максимумов.

Михайлова Александра Борисовна, к.т.н.
119991 г. Москва Ленинский проспект, д. 49
Тел.: 8(499)1359618; Факс: 8(499)1358680; E-mail: Almikhailova@yandex.ru

НЕЙТРОНОВОДНАЯ СИСТЕМА ПОМЕЩЕНИЯ 104 РЕАКТОРА ПИК

Е.В. Москвин¹⁾, В. Пусенков, А.А. Булкин²⁾, Д. Головастов²⁾

¹⁾*Петербургский Институт Ядерной Физики РАН, Гатчина, 188300, Россия*

²⁾*Протон, Санкт-Петербург, Россия*

Нейтронородная система реактора ПИК была спроектирована в 80-х годах прошлого столетия и морально полностью устарела. В 2010-2011 г. была проведена модернизация нейтронородной системы реактора ПИК. Современные программные пакеты численного моделирования нейтронных потоков позволяют оптимизировать параметры каждого отдельного нейтронорода еще на этапе проектирования нейтронородной системы и самих приборов. Для расчета новой нейтронородной системы использовался пакет McStas.

Основные особенности нейтронородной системы следующие:

- ▲ фильтрация и расщепление нейтронного пучка осуществляется в пределах главного зала и кольцевого коридора. Основной вес защиты смещается из нейтронородного зала (помещение 104) в главный зал и кольцевой коридор, несущие конструкции которых способны выдерживать большую весовую нагрузку;
- ▲ фильтрующие и отклоняющие элементы, расположенные в кольцевом коридоре, отклоняют пучки на углы 0.02-0.04рад (1.1°-2.3°) и нивелируют конструкционную ошибку;
- ▲ в нейтронородный зал выводится пучки нейтронов только необходимого сечения и расходимости для каждого прибора;
- ▲ приборы со сходной расходимостью объединены в общую нейтронородную систему, тем самым осуществляя экономию на покрытиях общего нейтронородного тракта и вакуумных кожухах;

В настоящий момент система нейтронородов готова к реализации на практике. Установка и юстировка нейтронородов может быть осуществлена одновременно с установкой нейтронных инструментов, перевозимых из HZG в рамках сотрудничества между ПИЯФ и HZG.

Москвин Евгений Владимирович, к.ф.-м.н.
188300, Гатчина, Ленинградская обл., ПИЯФ РАН
Тел.: (81371)46715; Факс: (81371)39025; E-mail: mosqueen@pnpi.spb.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЗАПРЕЩЕННЫХ ОТРАЖЕНИЙ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ KN_2PO_4

Г.Т.Мулявко¹⁾, Е.Н.Овчинникова ¹⁾, А.П.Орешко ¹⁾, В.Е.Дмитриенко ²⁾

¹⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН им. А.В.Шубникова, Москва*

В работе проведено моделирование энергетических спектров «запрещенных» отражений при резонансной дифракции рентгеновского излучения в кристалле KN_2PO_4 (в дальнейшем KDP) в широком интервале температур. Симметрия положения атомов калия в параэлектрической фазе (пространственная группа $\bar{1}42d$) запрещает существование отражений типа hhl , $2h+l=4n+2$. Этот запрет не снимается и при учете диполь-дипольного резонансного рассеяния вблизи К-края поглощения калия. Однако, при переходе в сегнетоэлектрическую фазу (температура перехода 123 К), диполь-дипольное рассеяние становится разрешенным.

Существует три причины, приводящие к возникновению «запрещенных» отражений в параэлектрической фазе KDP, а именно: диполь-квадрупольное резонансное рассеяние, термоиндуцированный диполь-дипольный вклад в атомный фактор и искажение локального окружения атомов калия, связанного с неполной заселенностью позиции водорода. Было выполнено компьютерное моделирование энергетического спектра отражения 002 в KDP при температурах ниже и выше точки фазового перехода. Для расчетов в параэлектрической фазе было необходимо смоделировать мгновенные конфигурации расположения атомов водорода, соответствующие искажения локального окружения, а также мгновенные тепловые смещения атомов, что было выполнено с использованием *ab initio* молекулярной динамики. Расчеты показали, что интенсивность отражения 002 растет с температурой, однако температурная зависимость отличается от наблюдаемой ранее в кристалле германия.

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-02-01293 и 10-02-00768.

Мулявко Григорий Тимофеевич

119991 ГСП Москва, Ленинские Горы, МГУ, Физический факультет

Тел.: 8(495)9391226; Факс: 8 (495)9328820; E-mail: muljavko@yandex.ru

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАПОЛНЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК БРОМИДОМ СЕРЕБРА И ХАРАКТЕРИСТИКИ ОБРАЗУЮЩИХСЯ НАНОСТРУКТУР

И.В.Мурин²⁾, А.К. Иванов-Шиц¹⁾, И.Ю.Готтлиб²⁾, А.В.Петров²⁾, Р.М.Закалюкин¹⁾

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

²⁾ *Химический факультет СПбГУ, С.-Петербурга*

Заполнение бромидом серебра углеродных одностенных нанотрубок (ОСНТ) различного диаметра (от 11.5 Å до 17.6 Å) моделируется методом молекулярной динамики. В системах AgBr@ОСНТ прилегающий к внутренней поверхности углеродной трубки слой бромида серебра, как правило, имеет вид свернутой двумерной тетрагональной или гексагональной кристаллической сетки. При диаметре углеродной ОСНТ $d \geq 13.5$ Å в центральной области трубки появляются дополнительные нити AgBr. В ходе заполнения углеродных ОСНТ бромидом серебра в застывающем расплаве наблюдается заметно бóльшая деформация трубок, чем в случае AgI, и в деформированных трубках AgBr чаще образует «тетрагональные» структуры – не только нанотрубки на основе тетрагональной сетки, но и (в сильно деформированных трубках) фрагменты объемной структуры типа NaCl. В то же время, согласно данным моделирования, в изолированных углеродных трубках после отжига образуются нанотубулярные структуры AgBr на основе гексагональной сетки. Таким образом, различие между структурными предпочтениями AgBr и AgI, обусловленное разностью радиусов анионов Br⁻ и I⁻, в трубках проявляется существенно слабее, чем в объемной фазе. Сходство нанотубулярных структур бромида и иодида серебра позволяет предположить, что в нанотрубках AgBr (в противоположность непроводящей объемной фазе со структурой NaCl) при определенных температурах возможна высокая подвижность ионов серебра во внутреннем «канале», аналогичная наблюдавшейся в компьютерном эксперименте для AgI@ОСНТ.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 11-03-00875) и СПбГУ (НИР 12.37.135.2011).

Иванов-Шиц Алексей Кириллович, профессор
119133, Москва, Ленинский пр., 59
E-mail: alexey.k.ivanov@gmail.com

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

А.В.Нагорный^{1), 2)}, В.И.Петренко^{1), 2)}, М.В.Авдеев^{1), 3)}, Л.А.Булавин²⁾, В.Л.Аксенов^{3), 1)}

¹⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

³⁾ *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

Магнитные жидкости (МЖ) – коллоидные суспензии магнитных наночастиц (2-30 нм), покрытых поверхностно-активными веществами (ПАВ) для предотвращения агрегации в различных условиях. В настоящее время МЖ находят широкое применение технологических приложений. Они активно исследуются в отношении биомедицинских применений. Управление макроскопическими свойствами данных систем требует определения их микроструктурных характеристик. Метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) является одним из наиболее информативных в структурных исследованиях наноуровня МЖ. В данной работе анализируются факторы, влияющие на практике на определение структурных параметров наночастиц МЖ по кривым МУРН (средний радиус наночастиц, ширина распределения по размерам, толщина оболочки ПАВ, параметр контраста и др.). К таким факторам относятся анизотропия формы частиц и остаточный некогерентный фон. Показано, что вклад анизотропии в рассеяние для типичных экспериментов становится несущественным для достаточно вытянутых частиц (параметр анизотропии свыше 4), при этом его необходимо рассматривать совместно с влиянием полидисперсности частиц. Относительный сдвиг в структурных параметрах МЖ при обработке кривых МУРН с учетом анизотропии частиц не превышает 10–20%. Основное влияние остаточного некогерентного фона связано с определением толщины оболочки ПАВ и параметра контраста. Показано, что ограничения по доступным максимальным значениям вектора рассеяния, измеряемым в эксперименте, может приводить к относительному сдвигу данных параметров до 10%, в то время как другие параметры определяются с достаточно высокой точностью (систематическая ошибка ниже 5%).

Нагорный Анатолий Васильевич
141980 Дубна, Моск. обл., Жолио-Кюри 6, ЛНФ, ОИЯИ
Тел.: (496-21)63299; Факс: (496-21)65484; E-mail: avnagorny@jinr.ru

МЕТОД РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ ДЕФЕТОВ В КРИСТАЛЛАХ

А.И.Низкова¹⁾, В.Б. Молодкин¹⁾, В.Л. Носик²⁾, В.Ф.Мачулин³⁾, В.П. Кладько³⁾,
С.В. Лизунова¹⁾, В.В. Лизунов¹⁾, Я.В.Василик¹⁾

¹⁾ *Институт металлофизики НАН Украины, Киев*

²⁾ *Институт кристаллографии РАН, Москва*

³⁾ *Институт физики полупроводников НАНУ, Киев, Украина*

Создана модель рентгеноакустической интегральной динамической дифрактометрии в геометрии дифракции Лауэ с учетом большого вклада диффузного рассеяния. Установлено, что характер зависимости от амплитуды ультразвуковой волны интегральной интенсивности динамического рассеяния (ИИДР) определяется результатом конкуренции соответствующих зависимостей отдельно динамической отражательной (которая существенно увеличивается с ростом амплитуды) и динамической поглощательной (которая при этом существенно уменьшается) способностей кристалла.

Показано, что результат этой конкуренции может существенно управляться и оптимизироваться целенаправленным изменением условий динамической дифракции, в частности толщины кристалла, фактора асимметрии или длины волны излучения. Показано, что за счет установленного существенного отличия зависимостей от амплитуды ультразвуковой волны брэгговской и диффузной составляющих ИИДР принципиально повышается информативность диагностики хаотически распределенных дефектов при рентгеноакустической диагностике.

Низкова Анна Ивановна, профессор
03680, Украина, Киев, бульв. Академика Вернадского, 36
Тел.: +(38044)4240530; Факс: +(38044)4242561; E-mail: nizkova@imp.kiev.ua

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ДИФРАКЦИОННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ СКОПЛЕНИЙ ИЗ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

С.Н. Новиков, А.Я. Струк, И.М. Фодчук

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Черновцы, Украина

Использование экспериментальных дифракционных изображений дефектов позволяет определить и уточнить не только их деформационные, а также характер взаимовлияния более сложных дефектов и их комплексов. В тоже время однозначная интерпретация топографического дифракционного контраста является сложной проблемой даже для единичных дефектов [1]. Поэтому моделирование топографических изображений комплексов дефектов наверняка является эффективных методов их идентификации по дифракционному контрасту.

На основе численного решения уравнений Такаги, проведено исследование особенностей формирования дифракционных изображений комплексов из краевых дислокаций, образующих микроскопления из двух, трех и более дислокаций перпендикулярных входной и выходной поверхностям [2]. Наблюдается целый ряд дифракционных эффектов волновых полей, порожденных на сильно искаженных областях кристалла вдоль линий дислокаций. Выявлено разнообразные по интенсивности интерференционные эффекты перераспределения и внутреннего отражения порожденных "новых" и уже существующих волновых полей на толщинных распределениях интенсивности при наличии в одной плоскости скольжения краевых дислокаций с параллельными и антипараллельными векторами Бюргерса (рис. 1).

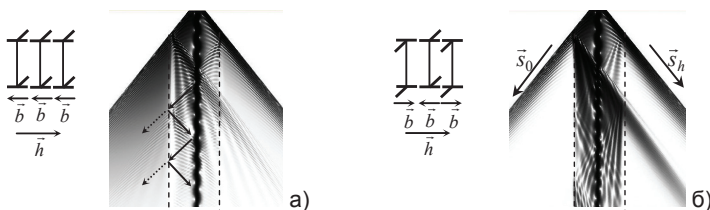


Рис.1. Центральные фрагменты распределений интенсивности, при наличии в кристалле Si дислокационного скопления из трех однознаковых (а) и разнознаковых (б) дислокаций, линия которых перпендикулярна вектору дифракции, и которые расположены на расстоянии 50 мкм (Пунктир - линии дислокаций).

1. Суворов Э.В., Смирнова И.А. *ФТТ*, Т. 52, Вып.12: 2325 (2010).
2. Новиков С.Н., Струк А.Я., Фодчук И.М., *Металлофизика и новейшие технологии*, Т.32, №9: 1198 (2010).

Новиков Сергей Николаевич, доцент
58012, Черновцы, Украина, ул. Коцюбинского, 2
Тел.: (03722)44834; E-mail: dzuna@rambler.ru

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛА НА «ЗАПРЕЩЕННЫЕ» ОТРАЖЕНИЯ В РЕЗОНАНСНОЙ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.Н.Овчинникова¹⁾, Г.Т.Мулявко¹⁾, А.П.Орешко¹⁾, Э.Х.Мухамеджанов²⁾,
В.Е.Дмитриенко³⁾

¹⁾ *Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва*

²⁾ *Курчатовский НБИК-центр, Москва*

³⁾ *Институт кристаллографии РАН им. А.В.Шубникова, Москва*

В настоящей работе продемонстрировано влияние статической деформации на интенсивность, энергетическую и азимутальную зависимость «запрещенных» отражений, существующих при энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения в кристаллах. Особенно сильно эффект проявляется в тех кристаллах, симметрия которых запрещает существование диполь-дипольного вклада в резонансный атомный фактор. Подобные эффекты должны возникать и при наложении акустической волны, так как она приводит к понижению симметрии системы за счет деформации элементарной ячейки, а также к структурной релаксации. Как следствие могут возникать диполь-дипольные вклады в структурный фактор, запрещенные в отсутствие возмущения. При этом может происходить не только возрастание интенсивности, но ещё и существенное изменение формы энергетической и азимутальной зависимости «запрещенного» отражения.

В работе проведено численное моделирование изменения интенсивности, энергетического спектра и азимутальной зависимости «запрещенных» отражений для двух пьезоэлектрических кристаллов: оксида цинка ZnO и дигидрофосфата калия KH_2PO_4 . Рассмотрены именно такие примеры, когда брэгговские отражения после наложения возмущения остаются «запрещенными», но в их структурных факторах возникают вклады от рассеяния с более низкой мультипольностью [1].

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-02-01293 и 10-02-00768.

1. Г. Т. Мулявко, Е. Н. Овчинникова, А. П. Орешко, В. Е. Дмитриенко, Э.Х.Мухамеджанов. Кристаллография. 2011, том 56, № 4, с. 640–646

Овчинникова Елена Николаевна, доцент
119991, Москва, Ленинские Горы, МГУ, физический факультет
Тел.:8(495)9391226; Факс: 8(495)9328820; E-mail:ovtchin@mail.ru

РЕЗОНАНСНЫЕ "ЗАПРЕЩЕННЫЕ" ОТРАЖЕНИЯ В СТРУКТУРАХ ТИПА ВЮРЦИТА

А.П.Орешко¹⁾, Е.Н.Овчинникова¹⁾, В.Е.Дмитриенко²⁾

¹⁾ МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва

²⁾ Институт кристаллографии РАН, Москва

"Запрещенные" отражения наблюдаются при дифракции синхротронного излучения с длинами волн, близкими к краям поглощения атомов, в кристаллах. Резонансная спектроскопия "запрещенных" отражений обладает уникальными возможностями для исследования структуры и свойств твердых тел и находит все более широкое применение в настоящее время. Отличительной особенностью данного метода является возможность получения информации о локальных атомных конфигурациях, не усредненной по элементарной ячейке.

В данной работе проводится численное моделирование "запрещенных" отражений в оксиде цинка и нитриде галлия со структурой вюрцита, основанное на предварительном определении мгновенных атомных конфигураций (с учетом температуры и наличия дефектов) методами первопринципной молекулярной динамики (*CPMD* (cpmd.org) и *ABINIT* (abinit.org)) с последующим расчетом реальных тензорных атомных рассеивающих факторов (*FDMNES* (neel.cnrs.fr)). Показано хорошее соответствие полученных результатов с экспериментальными данными.

Моделирование проводилось на суперкомпьютерном комплексе МГУ "СКИФ" (parallel.ru/cluster). Работа поддержана грантами РФФИ 09-02-01293-а и 10-02-00768-а.

Орешко Алексей Павлович, доцент
119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, 1
Тел.: 8(495)9391226; E-mail: oreshko@mail.ru

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ МИКРО- И НАНООБЪЕКТОВ В МЕТОДЕ ФАЗОВОГО КОНТРАСТА ЦЕРНИКЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

М.А. Орлов²⁾, В.Г. Кон¹⁾

¹⁾ *Национальный исследоват. центр «Курчатовский Институт», Москва*

²⁾ *Московский государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва*

Начиная с 1995 года на источниках синхротронного излучения (СИ) активно развивается метод рентгеновского фазового контраста, позволяющий исследовать структуру слабопоглощающих объектов. Однако в ряде случаев этот метод имеет недостатки. Во-первых, он дает не изображение объекта, а голограмму, по которой необходимо восстановить объект. Во-вторых, этот метод слабо чувствителен к плавным изменениям плотности в образце. Этих недостатков можно избежать, если использовать в рентгеновском диапазоне метод фазового контраста Цернике, широко применяемый в оптике.

Мы провели компьютерное моделирование фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении. В расчетах были использованы типичные параметры для источников СИ третьего поколения. Перенос излучения в воздухе описывался с помощью пропагатора Кирхгофа, взаимодействие излучения с объектами описывалось с помощью трансмиссионной функции, учитывающей локальные характеристики объектов. Расчеты проводились с помощью быстрого преобразования Фурье.

Известно, что преломляющая линза позволяет достичь лучшего разрешения, чем зонная пластинка [1]. Однако линза сильно поглощает на краях, но изображение объектов легко восстановить, разделив конечный профиль интенсивности на функцию поглощения в линзе. При изображении пор в веществе выгоднее использовать отверстие в материале вместо фазосдвигающей пластинки. В изображении сильно вытянутых объектов возникают осцилляции, по которым также можно восстановить структуру объекта. Показано, что некогерентность пучка не оказывает существенного влияния на изображение.

1. В. Г. Кон, М. А. Орлов. Поверхность, 2010, N. 11, с. 76-81

Михаил Андреевич Орлов

МГУ им М.И.Ломоносова

Тел.: 8(919)7705308; E-mail: mikhorlov@yandex.ru

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МУЛЬТИЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОГРАФИИ МЕТОДОМ ИНДЕКСНЫХ ЭФФЕКТИВНЫХ АТОМНЫХ НОМЕРОВ

С.М.Осадчий

ЗАО «НТЦ Экспертцентр», Москва

В мультэнергетической рентгенографии просвечивание объекта осуществляется в нескольких диапазонах спектра или на нескольких фиксированных энергиях, что позволяет существенно повысить информативность рентгенографии и получить сведения об объекте, например о его химическом составе. Технически это реализуется с применением нескольких детекторов с разными сцинтилляторами, работающими в различных энергетических диапазонах. Решение уравнений мультэнергетической рентгенографии, в которых учитываются все типы взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, состоящим из большого количества химических элементов сложно и неоднозначно. В настоящей работе получены уравнения для мультэнергетической рентгенографии в приближении, учитывающем фотопоглощение, когерентное и некогерентное рассеяние, а также в предположении, что вещество не содержит химических элементов с $Z > 40$. В энергетическом интервале $E_{K40} < E < m_e c^2$, где E_{K40} - энергия соответствующая K-линии элемента с $Z=40$, $m_e c^2$ - энергия покоя электрона, использовались явные аналитические и аппроксимационные зависимости сечения поглощения от Z и E , предоставляющие возможность решить задачу определения Z . Показано, что для простого вещества, состоящего из одного химического элемента, Z может быть найден как корень кубического уравнения. Для сложного вещества, состоящего из двух химических элементов и более, предложено решение системы уравнений мультэнергетической рентгенографии путем сведения их к системе линейных уравнений, решению линейной системы и введения дополнительных параметров: индексных эффективных атомных номеров, определяемых из решений линейной системы. Предложенный метод обеспечивает максимальную точность определения состава вещества. Приведены результаты экспериментального подтверждения правильности предложенных решений.

Осадчий Сергей Михайлович, к.ф.-м.н.
127254, Москва, а/я 12, ЗАО «НТЦ Экспертцентр»
Тел.: 8(495)7926542; E-mail: o-s-m@inbox.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЪЕКТОВ ПАЛЕОНТОЛОГИИ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ НА СИНХРОТРОННОМ ИЗЛУЧЕНИИ

А.В.Пахневич¹⁾, А.А.Калоян²⁾, Е.С.Коваленко²⁾, К.М.Подурец²⁾, С.В.Рожнов¹⁾,
В.А.Соменков²⁾

¹⁾ Палеонтологический институт им. А.А.Борисяка РАН, г. Москва

²⁾ НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

Рентгеновская компьютерная томография является одним из ведущих методов неразрушающего исследования в палеонтологии, однако, доля успешных исследований (когда в объектах обнаруживаются какие-либо структуры) невелика, и колеблется в широких пределах в зависимости от химического состава исследуемых объектов и окружающих их пород. Поэтому актуальной является задача повышения чувствительности метода, и одной из возможностей такого повышения является применение синхротронного излучения (СИ). Преимуществами СИ являются высокая коллимация и интенсивность, что дает возможность применения фазочувствительных методов контрастирования. Были исследованы образцы ископаемых иглокожих (*rhepidocystis*, *crinoidea* и т.п.). Показано, что применение съемки с рефракционным контрастом позволяет существенно повысить контрастность изображений и, соответственно, томографической реконструкции.

Пахневич Алексей Валентинович
117997, Москва, ул. Профсоюзная, д.123
E-mail: terebratulina@gmail.com

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ, СЕЛЕНИДА СВИНЦА И АНТИМОНИДА ИНДИЯ

Л.С. Пирогова, А.И. Калугин, В.В. Соболев, Н.И. Петрова, Д.А. Перевощиков

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Целью настоящей работы было исследование электронной структуры кристаллов PbSe, CdTe, InSb с учетом спин-орбитального расщепления. Расчеты выполнены методом LAPW с помощью пакета программ Wien2k [1]. Рассматриваемые соединения очень популярны как материалы для оптоэлектронных устройств. Ширина запрещенной зоны E_g очень мала у InSb (~0.25 эВ) и PbSe (0.3 эВ). Для CdTe E_g возрастает до 1 эВ. Нами для трех кристаллов PbSe, CdTe, InSb рассчитаны зоны, плотности состояний и спектры диэлектрической проницаемости с учетом и без учета СО взаимодействия. Обычно учет релятивистских поправок проявляется только в расщеплении зон. Для теллурида кадмия и изоэлектронного ему антимонида индия зоны оказались схожими: верхняя валентная зона (ВВЗ) дублетно расщеплена, а ее вершина расположена в центре зоны Бриллюэна (ЗБ). Однако для PbSe СО взаимодействие столь велико, что приводит к заметным изменениям дисперсии зон во многих направлениях ЗБ. Теоретическое значение ширины запрещенной зоны во всех одноэлектронных расчетах занижается примерно в два раза. Для исправления этого недостатка зоны проводимости обычно сдвигают вверх. С учетом этого сдвига результаты наших расчетов хорошо согласуются с экспериментальными сведениями по положениям полос и величинам расщеплений.

1. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz I. WIEN2k. An augmented plane wave+local orbitals program for calculating crystal properties (K. Schwarz. Techn. Univ. Wien, Austria). 2001. ISBN 3-9501031-1-2.

Пирогова Лилия Сергеевна
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

РАДИОЧАСТОТНЫЙ МОНИТОРИНГ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ДВУХМИШЕННОЙ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Е.А.Попов, В.Ю.Любимов, С.М. Куценко, Ю.Я.Петрушенко, Е.А.Салтанаева

Казанский государственный энергетический университет, Казань

Известно, что магнитомягкие структуры являются наиболее оптимальными материалами для компьютерных носителей информации, исходя из соотношения объём/цена. Вероятно, такая ситуация может стать ещё более закономерной при переходе на наноуровень, когда локальные размеры магнитной области необходимой для записи одного бита информации будут лежать уже в нанометровом диапазоне. Однако, при эволюции магнитных носителей информации в данном направлении, возможно, придётся решать вопросы, связанные с повышенной реакцией ансамбля магнитных наночастиц на внешние воздействия, в частности на внешние переменные магнитные поля и температуру магнитного носителя, приводящей к эффектам суперпарамагнитной релаксации. Для этого потребуются провести исследования магнитной структуры и магнитной динамики подобных материалов с помощью разнообразных методов, таких как измерение магнитной проводимости, рентгеноструктурный анализ и рентгеновская дифракция, магнитная нейтронография, ЭПР, ЯМР. Среди них можно отметить гамма-резонансную спектроскопию (ГРС), позволяющую получать подробную информацию о локальном магнитном окружении и локальной магнитной динамике мёссбауэровского зонда ^{57}Fe . Среди методик ГРС выделим двухмишенную схему, которая может быть полезна в данном случае из-за повышенной чувствительности измерительного процесса к внешним воздействиям. Суть её заключается в том, что излучение неподвижного мёссбауэровского источника ^{57}Fe попадает на детектор, проходя через две мишени, одна из которых является неподвижным магнитным образцом, а вторая - двухуровневым резонансным анализатором, размещённом на мёссбауэровском вибраторе. В нашей работе проводится моделирование процесса гамма-резонансного рассеяния в двухмишенной схеме, когда магнитный образец подвергается воздействию внешнего радиочастотного поля.

Попов Евгений Александрович, профессор
420066, Казань, ул. Красносельская, д.51
Тел.: (843)519-43-27; Факс: (843)543-86-92; E-mail: popovevg@yandex.ru

**СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОДНОРОДНОСТИ
КРИСТАЛЛОВ GaSb(Te), ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ НАПРАВЛЕННОЙ
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В КОСМИЧЕСКИХ И НАЗЕМНЫХ УСЛОВИЯХ**

И.А. Прохоров¹⁾, И.Л. Шутьпина²⁾, Ю.А. Серебряков¹⁾,
В.Н. Власов¹⁾, В.С. Сидоров¹⁾, Е.Н. Коробейникова¹⁾

¹⁾ *Филиал Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН*

НИЦ "Космическое материаловедение", Калуга

²⁾ *ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*

Исследованы особенности реальной структуры кристаллов GaSb(Te), выращенных в условиях ослабленной термогравитационной конвекции по программе наземной подготовки полетных экспериментов и на борту автоматического космического аппарата "Фотон-М №3". Выявлен ряд специфических особенностей в распределении легирующей примеси, определяющих неоднородность кристаллов.

Рентгенотопографические исследования кристалла GaSb(Te), выращенного по программе послеполетных испытаний выявили существенное искажение формы первичного фронта кристаллизации, что, очевидно, послужило основной причиной нарушения монокристаллического роста и способствовало развитию крупноблочной структуры выращенных кристаллов. В космическом эксперименте обнаружено периодическое осевое распределение примеси с периодом $T \approx 90$ мин, соответствующим времени оборота спутника вокруг Земли. Такая периодичность, очевидно, связана с периодичностью изменения направления вектора остаточных микроускорений относительно фронта кристаллизации. Выявленные в наземном эксперименте периодичности с $T_1 \approx 5$ мин и $T_2 \approx 20$ мин связаны с особенностями теплопереноса при ослабленной термогравитационной конвекции. Микрооднородность космического образца выше наземного.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Калужской области (проект №09-02-97516).

Прохоров Игорь Алексеевич
248640, Калуга, ул. Академическая, 8, НИЦ КМ ФИК РАН
Тел.: (4842)728273; Факс: (4842)762767; E-mail: kmikran@spark-mail.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В РФА

С.К.Савельев¹⁾, Б.Д. Калинин¹⁾, Р.И. Плотников¹⁾, Ю.И.Сергеев²⁾

¹⁾ ООО «Прецизионные технологии», Санкт-Петербурга

²⁾ НПО «Спектрон», Санкт-Петербурга

Эффективная работа по применению метода рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и разработке новых программных средств и оборудования, реализующего этот метод, требует осуществления большого количества достаточно громоздких и не простых расчетов. Современные РФ приборы, как правило, оснащены развитым и весьма эффективным программным обеспечением, обеспечивающим основные потребности пользователя. Однако это программное обеспечение рентгеновских спектрометров по вполне понятным причинам привязано к определенной марке прибора и реализует, как правило, ограниченный набор для реализации способов качественного и количественного анализа. К тому же хотя и не очень быстрый прогресс в способах обработки данных приводит к старению специализированных программных продуктов более быстрому, чем физический и моральный износ самой аппаратуры. Кроме того, в рассматриваемой области существует большое число задач, как правило, не охваченных программным обеспечением, поставляемым с оборудованием. Это ограничивает применение РФА к анализу новых материалов, затрудняет разработку новых способов анализа и затрудняет проводить исследования по совершенствованию аппаратуры.

Указанный пробел может восполнить лабораторный информационно-вычислительный комплекс, который должен содержать справочную базу по фундаментальным параметрам взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, моделирующие программы, имитирующие генерацию рентгеновского излучения, возникновения флуоресцентного и рассеянного излучения при взаимодействии с анализируемым объектом, отклик элементов спектрометра на это излучение и реализовать различные способы построения градуировочной характеристики и проведения анализа. Подобный комплекс может быть реализован с применением справочно-вычислительной среды «X-ENERGO».

Савельев Сергей Константинович
196066, Санкт-Петербург, ул. Алтайская, 12, 34
Тел.: 8(921)9779041; Факс: 8(812)3733370; E-mail: ssavxray@yandex.ru

РАДИОЧАСТОТНЫЙ КОНТРОЛЬ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ В СХЕМЕ СТРОБОСКОПИЧЕСКОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А.Салтанаева, В.Ю.Любимов, Ю.Я.Петрушенко, Е.А.Попов

Казанский государственный энергетический университет, Казань

Синхротронное излучение (СИ) становится эффективным средством для рентгеноструктурных и рентгенодифракционных исследований ближнего и дальнего порядков в твёрдом теле. Появление источников СИ 3-го поколения, таких как ESRF (Франция), APS (США), SPring-8 (Япония) открыло дополнительные возможности по его использованию при изучении локального магнитного порядка и влиянию внешних воздействий, таких как давление, температура, переменные магнитные поля, на состояние магнитных материалов через канал ядерного резонансного рассеяния. Эти возможности значительно расширятся с рабочим вводом источников СИ 4-го поколения в США и Германии, разработанных на основе принципа лазера на свободных электронах. Исследования локального магнитного порядка и магнитной динамики под влиянием внешних воздействий становятся актуальными в связи с желанием использовать наноструктурированные магнитные материалы в качестве носителей информации в информационных технологиях. В существующих на сегодняшний день экспериментальных подходах при исследовании магнитных материалов с помощью ядерного резонансного рассеяния СИ выделяются те, которые проводятся в канале рассеяния вперёд, в силу более простотой реализации и интерпретации экспериментальных данных. Исходя из вышесказанного, в данной работе проводится моделирование ядерного рассеяния вперёд синхротронного излучения в схеме стробоскопического детектирования, где СИ одновременно взаимодействует резонансным образом с неподвижной магнитной ядерной мишенью, которая подвергается воздействию внешнего радиочастотного поля, и двухуровневой, движущейся по определённому закону на мёссбауэровском вибраторе. Детектирование резонансного отклика такой системы двух мишеней осуществляется внутри периодической последовательности временных окон одинаковой ширины.

Салтанаева Елена Андреевна, ассистент

420066, Казань, ул. Красносельская д.51

Тел.: (843)5194327; Факс: (843)5438692; E-mail: elena_maister@mail.ru

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ИОНОВ

Н.Р. Саркар¹⁾, И.В. Амирханов¹⁾, А.Ю. Дидык²⁾, И.В. Пузынин¹⁾, Т.П. Пузынина¹⁾,
И. Сархадов¹⁾, З.К. Тухлиев¹⁾, З.А. Шарипов¹⁾

¹⁾ *Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

²⁾ *Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флерова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

В работах [1-2] исследованы фазовые переходы, возникающие в металлах под действием импульсных пучков ионов, в рамках одного уравнения теплопроводности.

В настоящей работе та же задача исследуется в рамках модели термического пика. Проведено исследование зависимости фазовых переходов от интенсивности, длительности и способа действия источника.

Проведен также сравнительный анализ полученных результатов с результатами работ [1-2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты N 11-01-00278-а, N 09-01-00770-а.

1. И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов. Численное моделирование фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164, Дубна, 2001, 14 с.

2. И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов. О влиянии формы источника в модели фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов. Сообщение ОИЯИ Р11-2002-78, Дубна, 2002, 18 с.

Саркар Нил Ратан
141980, Дубна, ул.Жолио-Кюри, д.6
Тел.: (49621)62547; Факс: (49621)65145; E-mail: sarker@jinr.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ВОЗНИКАЮЩИХ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

И.С. Сархадов¹⁾, И.В. Амирханов¹⁾, А.С. Халил²⁾

¹⁾ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²⁾ Таббинский металлургический институт, Каир, Египт

В работах [1-3] исследованы тепловые процессы, возникающие в материалах под действием тяжелых ионов высоких энергий в рамках модели термического пика.

В настоящей работе та же задача исследуется для фосфатия индия InP, облученного ионом золота Au с энергией $E=200$ МэВ с применением модифицированных функций источников, которые учитывают движение иона.

Проведен сравнительный анализ полученных результатов с результатами статических источников, которые составлены без учета движения иона внутри материала.

Численным моделированием установлено, что динамики профилей температур электронного газа и кристаллической решетки для обоих случаев отличаются. В тех точках, где ион не долетел до них, температуры остаются комнатными и динамика фазовых переходов также отличаются.

1. I.V. Amirkhanov, A.Yu. Didyk, D.Z. Muzafarov, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, N.R. Sarker, I. Sarhadov, Z.A. Sharipov. Investigation of Thermal Processes in One-and Two Layer Materials Under Irradiation with High-Energy Heavy Ions within the Thermal Peak Model // Crystallography Reports, 2006, Vol. 51., Suppl. pp. 32-43.

2. I.V. Amirkhanov, A.Yu. Didyk, D.Z. Muzafarov, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, N.R. Sarker, I. Sarhadov, Z.A. Sharipov. A Nonlinear Thermal Spike Model for Pyrolytic Graphite under Irradiation with ²⁶Kr and ²⁰⁹Bi High Energy Heavy Ions // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2009, Vol.3., № 3, pp. 402-410.

3. И.В. Амирханов, А.С. Халил, И. Сархадов. Численное моделирование фазовых переходов, возникающих в материалах под действием тяжелых ионов высоких энергий // Тезисы докладов всероссийской конференции "Информационно-коммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем, 18-22 апреля 2011 г., РУДН, Москва, Россия, с. 280-282.

Сархадов Иброхим

141980, Дубна, ул.Жолио-Кюри, д.6

Тел.: (49621)62547; Факс: (49621)65145; E-mail: ibrohim@jinr.ru

ТРЕХВОЛНОВАЯ ПОПРАВКА К ДВУХЛУЧЕВОМУ ПРИБЛИЖЕНИЮ В ЗАДАЧЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

А.Н. Тюлюсов, Н.О. Елютин

ФГУП ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва

Динамическая теория в настоящее время является основой для описания процессов дифракции на монокристаллах, независимо от природы волновых процессов – будут ли это рентгеновы лучи, тепловые нейтроны либо быстрые электроны – достаточно лишь близости длины волны к параметру решетки кристалла. Наиболее часто в динамической теории используется двухлучевое приближение. В этом случае пренебрегается вкладом всех волн, кроме падающей и соответствующей сильному отражению [1], причем данное приближение хорошо согласуется с экспериментальными данными [2]. Представляет теоретический интерес учет многоволновых поправок к двухлучевому приближению.

В формализме уравнений Такаги [3] найдены трехволновые поправки для коэффициентов динамического пропускания и отражения. Рассмотрены случаи непоглощающего кристалла, слабого и сильного поглощения.

1. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Тюлюсов А.Н. ЯФ. 65. 1989 (2002).
2. Elyutin N.O., Smirnov Yu.I., Tyulyusov A.N., Cryst. Rep. 49(S1). S55 (2004).
3. В. А. Бушуев, А. Н. Тюлюсов, *Тезисы четвертой национальной конференции по применению Рентгеновского, Синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов*, с.255, (Москва, 1999).

Тюлюсов Антон Николаевич, н.с.
117218, Москва, ул. Большая Черемушнская, 25, ФГУП "ГНЦ РФ - ИТЭФ"
Тел.: 8(499)7896455; E-mail: tyulyusov@itep.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ МУАРОВЫХ КАРТИН, ВОЗНИКАЮЩИХ ОТ МИКРОЦАРАПИН В КРЕМНИИ

И.В.Фесив, Я.М. Струк, И.М. Фодчук

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Черновцы, Украина

В данной работе представлены результаты расчета рентгеновских муаровых изображений деформационных полей, возникающих от микроцарапин при действии сосредоточенной нагрузки на выходную поверхность анализатора кремниевого *LLL*-интерферометра. Для расчета муаровых картин использовано эйконоальное двухволновое приближение, в котором вектор дифракции является функцией пространственных координат и играет роль медленно меняющегося показателя преломления [1].

Рассмотрены различные модельные представления микроцарапин в виде одного и более рядов из определенным образом распределенных сосредоточенных сил, а также одно- и двусторонних дислокационных скоплений из 60-ти градусных дислокаций и дислокационных петель.

При наличии в кристалле структурного муара наблюдаются два типа полос (рис.1в,г), которые конкурируют между собой: муаровые полосы, обусловленные фазовым сдвигом интерферирующих волн в анализаторе интерферометра по отношению к первым двум пластинам и полосы деформационной природы. Область эффективного взаимодействия этих муаровых полос зависит не только от величины приложенной силы, но и от толщины кристалла

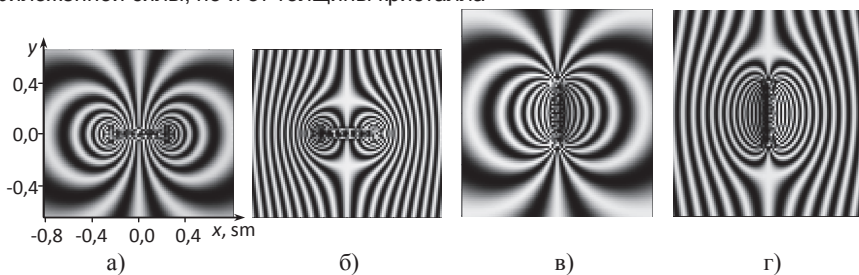


Рис. 1. Муаровые изображения микроцарапин, параллельных (а, б) и перпендикулярных (в, г) вектору дифракции \vec{H}_{220} (Si, $\text{CuK}\alpha_1$ -излучение) и представленных одним рядом из 15 сосредоточенных сил без (а, в) и при наличии фазового муара $\Lambda=1200$ мкм (б, г), Величина каждой локальной силы $P_d = 1$, а расстояние между ними - 400 мкм.

Отмечается качественное и количественное соответствие экспериментальных и рассчитанных как топографических так и муаровых изображений в области сильных деформаций и на значительном расстоянии от царапины [2].

1. I. M. Fodchuk, M. D. Raransky J. Phys. D: Applied Physics., **36**, A55 (2003)
2. M. D. Raransky, В.П. Шафранюк, I. M. Fodchuk // Металлофизика. - 1985. - 7, №5. - С.63

Фесив Игорь Васильевич, ассистент
58012, Черновцы, Украина, ул. Коцюбинского, 2
Тел.: (0372)44834; E-mail: ifodchuk@ukr.net

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ПОЛЯРИЗАЦИИ НА ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ ЭЛЕКТРОНОВ И ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ СЛОЖНОГО ОКСИДА СТРОНЦИЯ-МЕДИ

З.Н. Хакимов, В.В. Соболев, В.Вал. Соболев

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Сложное соединение $Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$ (SCO) кристаллизуется в цепочно-слоистой структуре. Оно перспективно для прикладных применений в оптоэлектронике. В работе [1] измерены спектры отражения монокристаллов SCO в области 0 – 24 эВ для поляризаций $E_{||a}$ и $E_{||c}$ при температурах 50, 250, 300 К. Наиболее детальную информацию об оптических свойствах получают после решения двух фундаментальных задач оптической спектроскопии. Первая из них состоит в получении комплекса оптических функций в широкой области энергии: коэффициентов отражения $R(E)$ и поглощения $\alpha(E)$; мнимой $\epsilon_2(E)$ и реальной $\epsilon_1(E)$ части диэлектрической проницаемости $\epsilon(E)$; оптической проводимости $\sigma(E)$ и комбинированной (объединенной) плотности состояний $J(E)$, равной $E^2\epsilon_2$ с точностью до универсального множителя при постоянной силе осцилляторов всех переходов; мнимых $(-Im\epsilon^{-1}, -Im(1+\epsilon)^{-1})$ и реальных частей $(Re \epsilon^{-1}, Re(1+\epsilon)^{-1})$ функций $1/\epsilon$ и $1/1+\epsilon$ и др. Эта задача обычно решается на основе измеренного $R(E)$ с применением компьютерных программ. Вторая задача оптической спектроскопии состоит в разложении спектров $\epsilon_2(E)$ и $-Im\epsilon^{-1}$ на элементарные компоненты и определении основных параметров каждой компоненты. Обе фундаментальные задачи оптической спектроскопии решены нами для кристалла SCO на основе экспериментальных спектров отражения при 50 и 300 К для двух поляризаций света в области 0 – 24 эВ, применяя методы расчётов работ [2]. Установлены основные особенности влияний поляризации света и температуры образца на спектры комплексов оптических функций. Полученные данные предоставляют базу для детальных обсуждений свойств и параметров кристалла SCO.

1. Ruydy et al. Phys.Rev.B. 75, 104510 (2007).

2. Sobolev V.Val., Sobolev V.V. Semiconductors and Semimetals 79, 201 (2004).

Хакимов Заман Насырович
426034, Ижевск, ул. Университетская, д. 1
Тел.: (3412)500587; E-mail: sobolev@uni.udm.ru

**МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В n-МЕРНОМ ПСЕВДОМЕТРИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ ДЛЯ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ
СЛОЖНЫХ СИСТЕМ**

В.Р. Хачатуров

Вычислительный Центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва

Излагаемый в работе метод применим для решения задачи определения значений параметров композиционных систем, удовлетворяющих заданным свойствам. Решается прямая задача (определение свойств объекта по заданным характеристикам его элементов) и малоисследованная обратная задача (определение характеристик элементов по заданным свойствам всего объекта).

Излагается общий метод моделирования композиционных объектов и его применение к задачам поиска материалов с наперед заданными свойствами. Множество всех возможных решений разбивается специальным образом в соответствии с известной диаграммой Эйлера-Венна на попарно непересекающиеся подмножества, называемые композиционными элементами. Число всех композиционных элементов не более, чем $N = 2^n$, а число составленных из них композиций не более чем 2^N , где n – количество критериев, характеризующих желаемые свойства. Показано, что рассматриваемая задача является задачей регуляризации для некорректных задач в n -мерном псевдометрическом пространстве. Различные элементы метода были опубликованы ранее в 1985, 1994, 2007 годах и использовались в ряде практических задач.

С 1994 года под моей редакцией в отделе Методов проектирования развивающихся систем ВЦ РАН регулярно выпускается сборник «Математическое моделирование композиционных объектов», в котором также публикуются статьи, относящиеся непосредственно к методам исследования наноструктурных материалов и информационной поддержке нанотехнологий.

Хачатуров Владимир Рубенович, д.ф.-м.н., профессор
119333, Москва, ул.Вавилова, 40
Тел.: 8(499)1352009; Факс: 8(499)1356159; E-mail: vladimir.khachaturov@rambler.ru

МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА РАСЧЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ПО РАЗМЕРАМ НАНОЧАСТИЦ ИЗ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ

А.В. Чекушин, В.В. Волков

*Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН, Москва*

Представлена модификация алгоритма расчета распределений по размерам наночастиц с заданным формфактором из данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния. Алгоритм основан на поиске распределения в виде модельной суммы парциальных распределений компонентов, представляющих собой системы наночастиц, функции распределения которых описываются распределением Шульца, с учетом межчастичной интерференции [1]. Параметрами модели являются средние значения размеров, ширины распределения и относительная доля каждого компонента. Поиск параметров осуществляется методом наименьших квадратов со взвешиванием. В качестве весовых функций предложено использовать обратные значения сглаженных экспериментальных данных, возведенные в степени 1, 0.5, 0.3 и 0.25. Показатель степени выбирают таким образом, чтобы динамический диапазон взвешенных данных составлял 1-2 порядка. После нахождения предварительного решения с заданным законом степенного взвешивания поиск параметров модели повторяют, вводя дополнительное взвешивание с помощью последовательности, отражающей величину систематического отклонения модельной кривой рассеяния от экспериментальной. Предложены алгоритмы расчета случайной и систематической составляющей ошибок в разностной кривой рассеяния, выбор начального приближения, а также критерии для построения весовых функций. На примере экспериментальных данных рассеяния от образцов полимерных и металлсодержащих наночастиц показана эффективность модернизированного алгоритма.

Литература

Svergun D.I., Konarev P.V., Volkov V.V., et al. // J. Chem. Phys. 2000. V.113. No.4. P.1651.

Чекушин Аремий Вениаминович, аспирант.

119333 г. Москва, Ленинский просп., дом 59.

Тел.:(499)1355450, E-mail: hansel@mail.ru

ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЙ ИЗОГНУТЫМИ ДЕФОРМИРОВАННЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

Т.Чен

Московская Государственная Академия Тонкой Химической Технологии им. М.В.Ломоносова, Москва, Российская Федерация

Динамическая теория дифракции рентгеновского излучения идеальными кристаллами с квадратичным полем смещений атомов была развита в 70-х годах прошлого столетия [1, 2]. Однако, эта теория была построена для брэгговских углов $\theta_B \neq \pi/2$. В настоящей работе представлена теория динамической дифракции рентгеновского и нейтронного излучений изогнутыми совершенными кристаллами, применимая для всех углов дифракции, включая $\theta_B = \pi/2$ (обратная дифракция). Показано, что уравнения Такаги-Топэн [3-5] справедливы для обратной дифракции, если не имеет место нормальное падение. В случае обратной дифракции для нормального падения следует учитывать производные второго порядка от амплитуд проходящей и дифрагированной волн.

Обобщенная динамическая теория применима как к одномерно- так и к двумерно изогнутым кристаллам. В частности, в настоящей работе развита теория дифракции в известной схеме Гамоша [6,7].

В качестве приложений обобщенной динамической теории были рассмотрены рентгеновские и нейтронные фокусирующие изогнутые спектрометры, монохроматоры, микроскопы. Построена теория этих устройств.

- [1] F.N. Chukhovskii, P.V. Petrashen', Acta Cryst. A33 (1977) 311.
- [2] F.N. Chukhovskii, K.T. Gabrielyan, P.V. Petrashen', Acta Cryst. A34 (1978) 610.
- [3] S. Takagi, Acta Cryst. 15 (1962) 1311.
- [4] S. Takagi, J.Phys.Soc.Jap. 26 (1969),1239.
- [5] D. Taupin, Bull.Soc.Fr.Mineral.Crystallogr. 87 (1964) 469.
- [6] L. Von Hamos, Annalen der Physik 17 (1933) 716.
- [7] L. Von Hamos, Annalen der Physik 19 (1934) 252.

Чен Тэсик, доцент
119571, Москва, Проспект Вернадского, 86. Тел.(499)246-46-42.
E-mail: chen.ft@mail.ru, physicist@rambler.ru

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ СБОРА РЕНТГЕНОФЛЮОРЕСЦЕНТНОГО СИГНАЛА ДЛЯ ДВУХ ТИПОВ КОЛЛИМАТОРОВ

Я.Л.Шабельникова^{1,2)}, М.В.Чукалина¹⁾

¹⁾ *Институт Проблем Технологии Микроэлектроники и особочистых материалов, Черноголовка*

²⁾ *Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Физический факультет, Москва*

Эксперимент по рентгенофлюоресцентной томографии в конфокальной схеме подразумевает сканирование образца сфокусированным рентгеновским пучком, фокус которого совмещен с фокусом коллиматора, установленного перед окном энергодисперсионного детектора. Под воздействием рентгеновского излучения атомы образца испускают флуоресцентные кванты. Флуоресцентное излучение, собираемое из фокального объема коллиматора, регистрируется в детекторе. По результатам обработки спектра зарегистрированного излучения рассчитывают концентрации элементов в данном объеме образца.

В такой постановке для характеристики коллиматора удобно ввести функцию сбора коллиматора как отношение зарегистрированной в детекторе интенсивности флуоресцентного сигнала к интенсивности флуоресцентного сигнала, испущенного атомами образца.

В докладе представлены результаты расчета функции сбора поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники. Результаты обсуждаются для характеристических линий от 3 до 30 кэВ.

Шабельникова Яна Леонидовна
142432, Черноголовка, ул. Институтская, д.6
Тел.: (496)5224214; E-mail: janeshabeln@yandex.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

З.А. Шарипов, И.В. Амирханов, А.Ю. Дидык, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина,
Н.Р. Саркар, И. Сархадов, З.К. Тухлиев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Одной из актуальных задач радиационной физики является исследование воздействия тяжелых заряженных частиц высоких энергий на элементы микроэлектроники. Важными полупроводниками, по масштабам использования в микроэлектронике после кремния и германия является арсенид галлия (GaAs) и фосфид индия (InP). Фосфид индия перспективен для разработки сверхбыстрых интегральных схем.

В [1] представлены экспериментальные результаты по изменению структуры поверхности и объемных свойств монокристаллического InP и GaAs при облучении различными тяжелыми ионами высоких энергий.

В настоящей работе проведено исследование тепловых процессов в монокристаллах InP и GaAs при облучении различными тяжелыми ионами высоких энергий в рамках модели термического пика [2,3].

Численным моделированием оценены размеры областей, где происходят процессы плавления и могут происходить структурные изменения в облучаемых материалах.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ, № 09-01-00770-а, 10-01-00467-а, 11-01-00278-а.

1. Дидык А.Ю., Халил А.С. Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ). 2010. Т.41. Вып.2. С. 431-521.
2. Лифшиц И.М. Докл. АН СССР. 1956. Т.109. № 6. С.1109-1111.
3. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В. и др. Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ). 2006. Т.37. Вып.6. С.1592-1644.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука. 1977. С.474-490.

Шарипов Зариф Алимжонович,
141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6
Тел.:8(49621)64808, факс: 8(49621)65145, E-mail: zarif@jinr.ru

ИЗУЧЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ И ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ ГЛЮКОАМИЛАЗЫ G1 ИЗ ГРИБА *ASPERGILLUS AWAMORI* X-100

А.Е.Шмидт, А.В.Швецов, М.А.Суржик, Е.А.Глазунов, Т.Н.Кожина, М.Г.Петухов

Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Глюкоамилаза – фермент, принадлежащий к классу гидролаз, который последовательно отщепляет в процессе реакции гидролиза глюкозные остатки от нередуцирующих концов крахмала, гликогена, мальтоолигосахаридов. Фермент присутствует как у прокариот, так и у эукариот, и особенно распространен среди микроскопических грибов. Глюкоамилаза из *Asp. awamori* используется при промышленном производстве этанола и фруктозосодержащих сиропов из крахмала. Этот процесс включает в себя несколько стадий ферментативного гидролиза. В течение одной из этих стадий глюкозные остатки последовательно отщепляются глюкоамилазой от нередуцирующих концов мальтоолигосахаридов. Используемый в настоящее время фермент сохраняет свою активность при 60°C, что вынуждает производителей вводить специальную стадию охлаждения промежуточного оживленного продукта до требуемых более низких температур. Получение мутантной формы глюкоамилазы из гриба *Asp. awamori* X100, способной стабильно работать при 95°C, позволит осуществлять одностадийный комбинированный гидролиз крахмала с помощью термостабильных альфа- и глюкоамилаз при максимально высоких температурах. Это приведет к значительному увеличению скорости реакции и, соответственно, уменьшению себестоимости конечного продукта.

В данной работе впервые была построена модель полной формы глюкоамилазы G1 гриба *Asp. awamori* X100. Методами молекулярной динамики была изучена конформационная подвижность и термостабильность различных форм глюкоамилазы дикого типа и ее мутантов (G1 — с крахмалсвязывающим доменом, G2 — без крахмалсвязывающего домена) с учетом и без учета гликозилирования. Последующий анализ данных позволил выявить наиболее подвижные участки фермента. Стабилизация этих участков должна изменить свойства глюкоамилазы и привести к повышению ее термостабильности.

Полученные результаты хорошо коррелируют с экспериментальными данными, как полученными нами, так и известными из литературы.

Шмидт Александр Евгеньевич, ст. лаборант
188300 г. Гатчина, Орлова Роща, ОМРБ ПИЯФ РАН
Тел.: (81371)46660; Факс: (81371)32303; E-mail: schmidt@omrb.pnpi.spb.ru

СЕКЦИЯ VI

Аппаратурно-методическое
обеспечение эксперимента

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

МИКРОСИСТЕМЫ СБОРА И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ В РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

С.С. Алалыкин, А.С. Алалыкин, П.Н. Крылов

Удмуртский государственный университет, Ижевск

Одним из способов модернизации технической базы рентгеноструктурных исследований является применение микропроцессорных систем (микросистемы), способных заменить большое количество схемотехнических решений и возложить задачи проведения эксперимента на интеллектуальные микропрограммы, обладающие большой гибкостью и универсальностью, повышающие надежность и функциональную сложность приборов физического эксперимента. Вместе с тем, не имея достаточной параллельности вычислений и электрической согласованности управления, эти же микропроцессорные системы нуждаются в быстродействующих логических схемах, требующих высокой степени плотности. Решением данной проблемы может стать совокупность высокопроизводительного микроконтроллера с развитой периферией и программируемой логической матрицей CPLD или FPGA.

Схемотехническое решение, в совокупности с микропрограммой, в рамках данной работы было реализовано в предложенной микросистеме на базе 32-разрядных микроконтроллеров.

Для получения и обработки рентгенодифракционных спектров авторами был разработан специализированный программно-аппаратный комплекс SPR Components. Он позволяет управлять дифрактометрическим оборудованием типа ДРОН, получать рентгенодифракционные спектры, восстанавливать профили линий в спектрах от высокого уровня шумовых эффектов, выделять особенности спектральной зависимости, проводить декомпозицию спектров на составляющие его компоненты в целях дальнейшего количественного и качественного фазового анализа, определять параметры тонкой структуры материала образца. Предварительная математическая обработка данных возложена на аппаратную часть в виде математических функций статистического анализа.

Алалыкин Сергей Сергеевич
426034, Ижевск, ул. Университетская 1, корп. 4
Тел.: (3412)916133; E-mail: fft@udsu.ru

НОВЫЙ МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ КРИВЫХ ДИФРАКЦИОННОГО ОТРАЖЕНИЯ В РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ С ПОМОЩЬЮ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ МОДУЛЯЦИИ ПАРАМЕТРА РЕШЕТКИ

А.Е. Благов, М.В. Ковальчук, П.А. Просеков, А.В. Таргонский, И.С. Занавескина

ИК РАН, Москва

Предложен новый метод измерения углового распределения интенсивности дифракции - метод измерения кривых дифракционного отражения (КДО). Анализ проводится с помощью ультразвуковой модуляции параметра кристаллической решетки рентгеноакустического кристалла, используемого в этом методе в качестве анализатора. Отличительная особенность данного метода – возможность проводить прецизионные измерения с разрешением по времени без использования технически сложных гониометрических систем и поворотных столов.

Для реализации метода были разработаны элементы рентгеноакустической оптики, состоящие из пьезоэлектрического кристалла и рентгенооптического кристалла. Пьезоэлектрический кристалл использовался для создания и эффективного управления деформацией растяжения сжатия в рентгенооптическом элементе. Разработанные рентгенооптические схемы позволили использовать такие рентгеноакустические резонаторы в качестве анализаторов рассеянного рентгеновского излучения. КДО, измеренные указанным методом по форме и полуширине полностью соответствуют кривым, измеренным традиционным способом – вращением исследуемого кристалла. Будут представлены результаты апробации метода – примеры зарегистрированных КДО кристалла Si и TeO₂.

Угловое и временное разрешения метода определяются быстродействием регистрирующей аппаратуры и зависят от таких параметров как частота и амплитуда ультразвука. Было экспериментально достигнуто разрешение 0.1 угл. сек., которое можно увеличить не менее чем на порядок при использовании сверхбыстрого временного многоканального анализатора.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (ГК № 16.740.11.0095) и совета по грантам Президента РФ (грант № МК-156.2.2010).

Благов Александр Евгеньевич, к.ф.-м.н.
119333, Москва, Ленинский пр., д. 59
Тел.: 8(499)1356150; E-mail: blagov@crys.ras.ru

К ПРОБЛЕМЕ РАЗРЕШЕНИЯ БЛИЗКИХ МЕЖАТОМНЫХ РАССТОЯНИЙ С ПОМОЩЬЮ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ОГРАНИЧЕННОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПРОТЯЖЕННОСТИ

Л. А. Бугаев, Л. А. Авакян, В. В. Срабионян, А. Л. Бугаев

Физический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Применимость существующих критериев частотного разрешения сигналов в проблеме определения близких межатомных расстояний с помощью спектров рентгеновского поглощения ограниченной энергетической протяженности изучается в рамках подхода, основанного на Фурье-преобразовании спектров и многопараметрической оптимизации их Фурье-образов. Без нарушения общности, рассматриваются теоретические сигналы $\chi(k)$ с различной формой функциональной зависимости от аргумента k , среди которых – изучаемые в спектроскопии рентгеновского поглощения «структурные» факторы $\chi(k)$ (k – волновое число фотоэлектрона). Последние рассматриваются для различных значений двух межатомных расстояний R_1 и R_2 в модели локальных структурных искажений с тем или иным радиальным распределением координирующих атомов относительно поглощающего центра, включая и такие величины этих расстояний, которые заведомо не могут быть разрешены согласно используемым в настоящее время критериям. Установлено, что нижняя граница $\Delta R = |R_2 - R_1|$, при которой модель локальных структурных искажений может быть идентифицирована среди прочих альтернативных моделей с помощью используемого подхода, зависит от того, совпадает или нет форма зависимости от k у целевой функции в процедуре оптимизации с формой k -зависимости изучаемого сигнала $\chi(k)$, которая в рентгеновской абсорбционной спектроскопии надежно определена в настоящее время. В случае совпадения, нижняя граница значений ΔR , получаемых при использовании ограниченных интервалов $\Delta k \sim 3$ или 4 \AA^{-1} оказывается \sim в 10 раз меньше значений ΔR , предсказываемых существующими критериями. Изучено влияние статистического шума в интенсивности спектров на установленные граничные значения ΔR .

Бугаев Лусеген Арменакович, заведующий кафедрой
344037, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5,
Тел.: (863)2975336; Факс: (863)2975120; E-mail: bugaev@sfnedu.ru

**ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ «ЗЕЛЕНОГРАД»
КАК ИНСТРУМЕНТАЛЬНАЯ БАЗА ДЛЯ СОЗДАНИЯ СОВРЕМЕННОЙ НАНО-
И МИКРОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКИ**

Быков В.А.

*Президент группы компаний НТ-МДТ
Зам. директора по науке ФГУП «НИИФП им. Ф.В. Лукина»*

В настоящее время мир начинает осваивать 6-й технологический уклад, в котором нанотехнологии играют основную роль, входя в технологический конгломерат НБИК (Нано-Био-Инфо-Когно). Нанoeлектроника является одним из основных базовых полей этих технологий и ее развитие – это требование настоящего времени для стран, претендующих на позиции мировых лидеров.

Постановлением Правительства РФ № 498 от 02.08.2007 г. ФГУП «Научно-исследовательский институт физических проблем имени Ф.В. Лукина» назначен головной организацией в части прикладных и ориентированных научно-исследовательских опытно-конструкторских работ по направлению развития нанoeлектроники.

Во исполнение данного решения была разработана программа мероприятий, предполагающая комплексный системный подход к формированию мощной инфраструктуры для промышленного использования существующих наработок в области нано- и микросистемной техники, а также опережающее создание новых индустриальных решений с использованием технологического размерного уровня до 1 нм. Для этого был создан центр высоких технологий на базе синхротрона «Зеленоград». Использование синхротронного излучения для разработки и внедрения промышленных технологий нанoeлектроники и наномеханики позволит в короткие сроки наладить мелкосерийное производство устройств гражданского и специального назначения с предельными техническими характеристиками.

В рамках реализации предложенной программы ожидается кардинальный сдвиг технологических возможностей в целом ряде отраслевых рынков.

Современное рентгеновское аналитическое оборудование фирмы Bruker AXS (Д.Г. Голованов, ООО "Брукер")

Компания ООО "Брукер" на протяжении долгих лет официально представляет группу компаний Bruker на территории России и стран СНГ. Одним из направлений работы компании является подразделение Bruker AXS, производящее и разрабатывающее современные рентгеновские аналитические системы.

Спект продукции Bruker AXS достаточно широк: рентгеновские дифрактометры для фазового анализа и исследования тонкой структуры многослойных покрытий, монокристалльные дифрактометры, компактные настольные дифрактометрические системы, а также рентгенофлуоресцентные спектрометры, позволяющие решать любые задачи как в лаборатории, так и на производстве.

Дифрактометры Bruker AXS установлены в ведущих научных центрах России и всего мира, что позволяет компании реагировать даже на малейшие изменения в направлении исследований и вносить конструктивные изменения, а также адаптировать и постоянно совершенствовать программное обеспечение.

В настоящее время, для обычного фазового анализа при стандартных условиях, оптимальным выбором будет настольный дифрактометр D2 Phase. Данный прибор позволяет проводить количественный фазовый анализ в геометрии Брегг-Брентано, но сильно ограничен в области изменения условий анализа, таких как температура. Дифрактометр сочетает компактные размеры с твердотельным многоканальным детектором и стандартной рентгеновской трубкой. При этом рентгеновская трубка работает в пониженном режиме и не требует внешнего водяного охлаждения. Сочетание многоканального детектора и рентгеновской трубки позволяет получить ускорение съемки в 20 – 30 раз по сравнению с обычным дифрактометром, работающим с точечным детектором. В комплект поставки входит полный набор программного обеспечения для количественного фазового анализа и полнопрофильного уточнения по методу Ритвельда.

Для решения более сложных задач фазового анализа, компания производит профессиональный дифрактометр широкого назначения D8 Advance. Удобная конструкция рабочей зоны прибора позволяет легко размещать различные держатели образцов, включая подвеску Эйлера, а также устанавливать температурные и реакционные камеры. В зависимости от задач, прибор конфигурируется различной рентгеновской оптикой: классическая щелевая геометрия; фокусирующий $K_{\alpha 1}$ монохроматор; зеркало Гёбеля для работы в геометрии параллельного пучка; а также ряд других приспособлений. Помимо рентгеновской оптики, компания предлагает широкий выбор детекторов: классический сцинтилляционный счетчик, линейные твердотельный и газонаполненный детекторы, а также энергодисперсионный счетчик, избавляющий от необходимости использования вторичного монохроматора. Отдельно стоит отметить, что в большинстве случаев смена конфигурации происходит без перенастройки прибора, а современное оснащение позволяет распознавать тип модуля, установленный в дифрактометр.

Любые другие задачи, выходящие за пределы классического рентгено-фазового анализа, решаются на серии дифрактометров D8 Discover. Такие задачи, как микроанализ и картирование поверхности предъявляют высокие требования к интенсивности образцов и качеству точечного источника рентгеновского излучения, а также к детектирующей системе. В этом случае, в зависимости от пожеланий, прибор оснащается классической керамической рентгеновской трубкой, микрофокусным источником или генератором с вращающимся анодом. Маломощный микрофокусный источник приближается по интенсивности к генератору с вращающимся анодом, но требует значительно меньших затрат на постоянное и периодическое обслуживание, а также избавляет от активного внешнего водяного охлаждения.

Анализ тонкослойных многоплочных структур очень чувствителен к качеству прямого пучка, а именно: угловая расходимость и "чистота" $K_{\alpha 1}$ излучения. Немаловажным фактором является точность механики. Наши приборы серии D8 Discover удовлетворяют всем предъявляемым требованиям для проведения исследований на высоком мировом уровне.

Помимо оборудования, компания ООО "Брукер" осуществляет полную техническую поддержку оборудования: установка и введение приборов в эксплуатацию, методическая поддержка пользователей, а также все виды гарантийного и пост-гарантийного обслуживания.

Голованов Д.Г.,
ООО "Брукер", Москва, Россия
e-mail: dq@bruker.ru

РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ПРИ ИОНОПУЧКОВОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ВЫХОДА ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

В.К. Егоров, Е.В. Егоров

ИПТМ РАН, Черноголовка, Московская обл.

Исследования элементного состава материалов методом РФА обычно выполняются с использованием возбуждения выхода флуоресценции пучками электронов или потоками жесткого рентгеновского излучения. Достоинствами этих методов являются их экспериментальная простота и дешевизна, а также распространенность средств их реализации. Существует альтернативный способ возбуждения рентгенофлуоресценции потоком ионов с энергий $1\div 2$ МэВ [1]. Ионопучковая генерация ХРИ, в отличие от его возбуждения пучком электронов, демонстрирует пониженный уровень фона и не требует напыления поверхностного проводящего слоя. В сравнении с возбуждением вторичного ХРИ рентгеновским излучением применение ионных пучков характеризуется более высоким сечением возбуждения флуоресценции легких элементов. В работе представлены результаты сравнительного элементного анализа, выполненного РФА в условиях возбуждения флуоресценции потоком излучения $\text{MoK}\alpha$, и пучками ионов He^+ и H^+ с энергией $1\div 1.5$ МэВ. Выход рентгенофлуоресценции в обоих случаях регистрировался безазотным детектором XR-100CR с Be окном толщиной 12 мкм. При ионопучковом возбуждении детектор располагался внутри вакуумной камеры ионопучкового комплекса Сокол-3. Измерения при возбуждении потоком $\text{MoK}\alpha$ выполнялись на дифрактометре HZG-4. Исследования показали, что в условиях применения ионных пучков пределы обнаружения примесей легких элементов в сравнении с рентгеновским возбуждением снижаются более чем на порядок. Анализ содержания примесей тяжелых элементов с использованием линий $\text{K}\alpha$ более эффективен при рентгеновском возбуждении.

1. В.М. Коляда, А.Н. Зайченко, Р.В. Дмитренко. Рентгеноспектральный анализ с ионным возбуждением. М.: Атомиздат. 1978. 248 стр.

Егоров Владимир Константинович

142432, Черноголовка, ул. Институтская, 6, ИПТМ РАН

Тел.: (49652)41217; Факс: (49652)44225; E-mail: Egorov@iptm.ru

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕГИСТРАЦИИ ВЫХОДА ХРИ ПОД УГЛАМИ СКОЛЬЖЕНИЯ К ИЗУЧАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЗА СЧЕТ ПРИМЕНЕНИЯ ПРВП

Е.В. Егоров¹⁾, В.К. Егоров¹⁾, М.С. Афанасьев²⁾

¹⁾ИПТМ РАН, Черноголовка, Московская обл.

²⁾ИРЭ РАН, Москва

В методе РФА ПВО поток жесткого рентгеновского излучения падает на поверхность изучаемого объекта под углом, не превышающим критический угол ПВО для материала этого объекта, а регистратор вторичного характеристического рентгеновского излучения (ХРИ) располагается перпендикулярно исследуемой поверхности [1]. Существует альтернативный метод подобного анализа, в котором поток возбуждения падает перпендикулярно исследуемой поверхности, а регистрация вторичного ХРИ осуществляется под углом скольжения к этой поверхности (GE-XRS) [2]. В работе модифицирован этот метод путем включения в его экспериментальную схему плоского рентгеновского волновода-резонатора (ПРВП). В стандартной схеме GE-XRS метода значение регистрируемого потока оказывается крайне низким. Для повышения регистрируемого выхода поверхность исследуемого образца накрывается полированным Ве рефлектором, на края которого нанесены пленочные покрытия толщиной менее половины длины когерентности ($L/2 = \lambda_0^2 / 2\Delta\lambda$) ожидаемого вторичного ХРИ. Исследуемая поверхность и поверхность Ве рефлектора образуют волноводно-резонансный канал, способный формировать направленный поток характеристической флуоресценции, характерный для тонкого поверхностного слоя исследуемого объекта. Проведенные эксперименты показали, что включение подобного ПРВП в измерительную схему GE-XRS метода повышает интенсивность регистрации ХРИ более чем на порядок. Обсуждаются возможности дальнейшего повышения эффективности данного метода за счет применения ПРВП специальной конструкции.

1. R. Klockenkamper. Total Reflection X-ray Fluorescence analysis. Wiley: New York. 1997, 245 p.

2. X-ray Spectrometry: Recent Technological Advances / eds. K. Tsuji, J. Injuk, R. Van Grieken. Chester: Wiley. 2004. part 5.2. p. 293-305.

PERFORMANCE OF BE REFRACTIVE X-RAY LENS CHANGER FOR MICROFOCUSING APPLICATIONS
AT THE COHERENCE BEAMLINE P10 OF PETRAIII SYNCHROTRON FACILITY

A.B. Зозуля, S. Bondarenko, G. Gruebel, and M. Sprung

HASYLAB at DESY, Hamburg, Germany

Implementation of focusing optics at hard x-ray beamline provides advantages of increasing of x-ray flux density and localizing the x-ray probe. Microfocusing x-ray optics based on compound refractive lenses (CRL) [1] proved to have reliable performance and ease of alignment. CRL optics has a wide range of material and life science applications where the local microstructure of a sample is examined by raster scanning techniques.

The Coherence Beamline P10 at PETRA III synchrotron at DESY, Hamburg is dedicated to coherent x-ray scattering experiments using x-ray photon correlation spectroscopy (XPCS) [2] and coherent diffraction imaging (CDI) [3]. XPCS is the x-ray analogue of dynamic light scattering in the visible light range and CDI is an x-ray imaging technique which uses phase retrieval algorithms to reconstruct small objects from a coherent x-ray scattering pattern.

Since x-ray refractive lenses are strongly chromatic, different combinations of lenses have to be used to fulfil focusing conditions at a given photon energy and a given focal distance. Due to this fact, focusing devices with variable number of lens stacks have been proposed for focusing, pre-focusing or collimating x-ray beam at 3rd generation synchrotrons [4].

A CRL changer employing berillium parabolic refractive lenses has been recently developed and commissioned at the P10 beamline of PETRA III synchrotron. The lens changer is installed in the second experimental hut of P10 at the distance of 85 m from an undulator source. The device contains 12 slots with Be lens stacks, 4 stacks with 1D lenses and 8 stacks with 2D lenses, having curvature radii ranging from 50 to 1000 microns. Each stack is equipped with piezo actuator and can be independently positioned into the beam. These are 4096 possible lens combinations. Lens stacks are aligned on a high-precision v-shaped rail. The lens can be translated along the beam by +/- 150 mm. The CRL changer can provide 1D- and 2D-focused beam of micron spot size in a range of photon energies from 5 to 22 keV.

The performance of the CRL changer and the coherence of focused beam will be discussed. Application to scanning CDI of colloidal crystal using microfocusing setup at the P10 Coherence Beamline will be presented.

1. A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, and B. Lengeler. *Nature (London)* **384** (1996) 49.
2. I. Robinson, G. Gruebel, S. Mochrie. *New J. Phys.* **12** (2010) 035002.
3. I.A. Vartanyants and I.K. Robinson *J. Synchrotron Rad.* **10** (2003) 409.
4. G.B.M. Vaughan, J.M. Wright, A. Bytchkov, M. Rossat, H. Gleyzolle, I. Snigireva and A. Snigirev. *J. Synchrotron Rad.* **18** (2011) 125.

Dr Alexey Zozulya

HASYLAB at DESY/PetraIII, Notkestraße 85, D-22607 Hamburg, Germany
Tel.: +49 40 8998 4798; E-mail: alexey.zozulya@desy.de

АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ГЕНЕРАЦИИ ОНДУЛЯТОРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ EUV ЛИТОГРАФИИ НА ЗЕЛЕНГРАДСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИ

К.В. Золотарев¹, Г.Н. Кулипанов, Н.А. Мезенцев, С.В. Синяткин, А.В. Филипченко

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

Излучение с длиной волны 13.6 нм (Extreme ultraviolet или EUV) может эффективно отражаться и фокусироваться с помощью многослойной оптики, что в свою очередь позволяет реализовывать проективную литографическую технологию и обладает большим потенциалом, судя по современным тенденциям в производстве литографического оборудования. Однако, большой проблемой в развитии этого направления является отсутствие "чистых", т.е. не разрушающих оптику, источников излучения.

В данной работе проводится анализ возможности генерации ондуляторного излучения с длиной волны 13.6 нм на Зеленоградском источнике СИ в НИИ Физических проблем им. Ф.В.Лукина (НИИ ФП).

Современные технологии производства многополюсных сверхпроводящих устройств для генерации синхротронного излучения (СИ), которые успешно освоены в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера (г. Новосибирск), позволяют достигать рекордно высоких магнитных полей в короткопериодных вигглерах и ондуляторах.

В данной работе, на основе численного моделирования производится выбор параметров сверхпроводящего ондулятора и параметров электронного пучка для оптимизации мощности излучения с длиной волны 13.6 нм.

Представляемые результаты подтверждают возможность получения мощности основной гармоники до 2 Вт, что позволяет использовать данный источник для отработки литографических методик.

¹ Zolotarev@inp.nsk.su

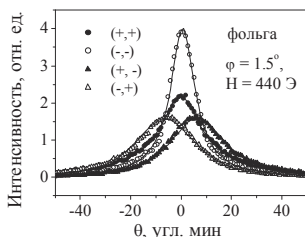
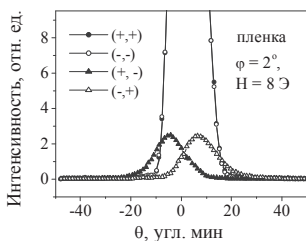
СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ, ПОЛУЧЕННЫХ НА ПЛЕНКАХ, ФОЛЬГАХ И МАССИВНЫХ ОБРАЗЦАХ

А.В.Ковалев

Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Угловые распределения интенсивностей малоуглового рассеяния нейтронов $J_k(\theta)$ получены на установке «Вектор» (реактор ВВР-М, Гатчина). Предложенная схема обработки результатов рефлектометрических измерений [1, 2] позволяет также наиболее полно использовать возможности малоуглового рассеяния на ферромагнитных фольгах и массивных образцах.

Характерные кривые $J_k(\theta)$ для поликристаллической пленки сплава $\text{Co}_{67}\text{Fe}_{31}\text{V}_2$ и фольги $\text{Fe}_{51}\text{Co}_{46}\text{V}_{2.5}\text{Mn}_{0.5}$ показаны на рисунке. Здесь φ – углы скользящего падения нейтронного пучка, магнитные поля приложены в плоскостях образцов, а



кривые $J(+,+)$ и $J(-,-)$ для пленки практически совпадают. Приводятся результаты измерений и на массивных образцах.

1. Ковалев А.В. ФТТ. 2010. Т. 52. С. 883.
2. Ковалев А.В. ФТТ. 2011. Т. 53. С. 669.

Ковалев Анатолий Васильевич, с.н.с.

188300, Гатчина, Ленинградская обл., Орлова роща, ПИЯФ Петербургский институт ядерной физики РАН

Тел: (81371)46409; Факс: (81371)39354; E-mail: kovalev@pnpi.spb.ru

ИНТРОСКОП МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ЗАПОМИНАЮЩИХ ЭКРАНАХ С МАТРИЧНЫМ СЧИТЫВАНИЕМ

В.И.Кондратьев¹⁾, Б.П.Толочко²⁾, И.Л.Жогин²⁾, А.В.Косов¹⁾, Б.Я.Пирогов²⁾

¹⁾ *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Интроскоп предназначен для исследования внутренней структуры малоконтрастных объектов (скрытые тексты рукописей, биологические микрообъекты, микросхемы и др.) в рентгеновском диапазоне. Принцип работы интроскопа следующий: исследуемый объект помещается в вакуумный объем и просвечивается расходящимся рентгеновским пучком, получаемое увеличенное рентгеновское изображение объекта проецируется на запоминающий экран и формирует в нём скрытое изображение, которое при облучении красным светом высвечивается с длиной волны 395 нм и считывается матричным считывателем, затем экран очищается.

В интроскопе использована рентгеновская трубка NOVA-600 фирмы Oxfordinstruments с размером фокусного пятна 15 мкм и запоминающие экраны фирмы Fuji Film. В качестве матричного считывателя используется детектор PIXIS-2048 с объективом Nikkor-28-70-f/2.8, обеспечивающий регистрацию изображения объекта в монохроматическом свете с длиной волны 395 нм с квантовой эффективностью регистрации не менее 55%. Как правило, существующие системы, использующие ПЗС матрицы, в этой области спектра не работают из-за низкой квантовой эффективности регистрации.

Динамический диапазон записи изображения интроскопа не хуже 64000, при любой экспозиции, т.к. шумы изображения возникают только в детекторе при считывании, время которого постоянно и составляет несколько секунд. Этот параметр чрезвычайно трудно осуществить на промышленных, стандартных детекторах из-за большого уровня темнового шума. Поэтому одно из основных требований к детектору – шум не более 5 e⁻gms. Пространственное разрешение интроскопа – 15 мкм.

Кондратьев Владимир Иванович.

630щ90, Новосибирск, ул.Лаврентьева, д.11

Тел.: (383)329-41-03; Факс: (383)330-71-63; E-mail: V.I.Kondratyev@inp.nsk.ru

МАЛОУГЛОВЫЕ РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ СТАНЦИИ НА БАЗЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ТРАНСФОКАТОРОВ ДЛЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.Н.Корнеев¹⁾, В.А.Шлектарев²⁾, А.В.Забелин³⁾, В.М.Аульченко⁴⁾,
Б.П.Толочко⁵⁾, Н.И.Арискин¹⁾, Н.Ф.Ланина²⁾, А.А.Вазина²⁾

¹⁾ *Институт биофизики клетки РАН, Пущино*

²⁾ *Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино*

³⁾ *НИЦ «Курчатовский Институт», Москва*

⁴⁾ *Институт Ядерной физики им. Будкера СО РАН, Новосибирск*

⁵⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Представлены основные результаты разработки рентгенографических станций, предназначенных для решения задач структурной биологии тканей с высоким временным разрешением при использовании синхротронного излучения (СИ) двух Российских центров коллективного пользования - Московского (НИЦ «Курчатовский институт», НБИК центр, «Сибирь-2», Москва) и Сибирского (ИЯФ СО РАН, ВЭПП-3, Новосибирск).

Обсуждаются вопросы выбора схемы и основных параметров рентгенооптических систем, исходя из экспериментальных результатов, полученных на созданных нескольких поколениях инструментального обеспечения для исследования динамики биологических наноструктур. В последней версии техники дифракционного кино «ДИКСИ» в качестве детектирующей системы использован позиционно-чувствительный беспараллаксный однокоординатный детектор ОД-3-1500. Для регистрации текстурированных рентгенограмм природных и синтетических материалов были использованы двухкоординатные детектирующие системы.

Представлены фото оригинальных конструкций созданной аппаратуры. Разработаны модульный принцип построения экспериментального оборудования и способы настройки монохроматизированного пучка СИ в требуемом спектральном диапазоне. Разработаны рентгенооптические трансфокаторы с переменным масштабированием изображения источника. Приведены экспериментальные результаты рентгендифракционных исследований различных биологических объектов при использовании разных систем регистрации.

Корнеев Владимир Николаевич, д.т.н.
142290 Пущино, ул. Институтская, д. 3
Тел.: (4967)739422; Факс: 8(4967)330509; E-mail: korneev@icb.psn.ru

УСТАНОВКА НПЧД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ НЕ СОХРАНЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ЧЕТНОСТИ В ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

В.Л. Кузнецов, А.И. Берлев, Е.В. Кузнецова
Институт ядерных исследований РАН

Приводится описание установки для исследования пространственно-нечетных эффектов в дифракции нейтронов на монокристаллах на импульсных источниках нейтронов ИЯИ РАН.

С помощью коллиматора соллера формируется пучок нейтронов с угловой расходимостью $3 \cdot 10^{-5}$ радиана и попадает на исследуемый монокристалл. Исследуемый монокристалл является поляризатором нейтронов (за счет пространственно не четного дихроизма) [1,2]. Дифрагировавший пучок нейтронов проходит через спин – флиппер и попадает анализатор поляризации дифрагированного пучка нейтронов. Детектирующая система состоит из трёх детекторов нейтронов и четырёх сцинтилляционных NaI детекторов γ - квантов. Два детектора нейтронов служат мониторами пучка нейтронов, один детектор нейтронов предназначен для измерения пространственно-нечетных эффектов в дифракции нейтронов. Детекторы γ - квантов, предназначены для тонкой юстировки исследуемого монокристалла [3]. Кроме того, сразу после коллиматора установлен монитор падающего на исследуемый монокристалл пучка нейтронов, многопроволочную пропорциональную камеру деления [4], которая прошла, успешные испытания на спектрометре по времени замедления в свинце.

Приводится описание системы регистрации и накопления сигналов детекторов и мониторов [5] и управления двух кристалльным спектрометром.

1. В.Л. Кузнецов. Препринт ИАЭ-4057/2, М.1984.
- 2.Л.Н. Бондаренко, С.В. Жуков, В.Л. Кузнецов, И.В. Матвеев. ЯФ, т.44, с.1121, 1986; Письма в ЖЭТФ, т.45, с.515, 1987, Письма в ЖЭТФ, т.46, с.222, 1987.
3. М.В. Ковальчук, В.Г. Кон. УФН, 149, с.69, 1986.
4. А.И. Берлев и др. Препринт ИЯИ РАН 1263/2010, 2010.
5. А.И. Берлев. Препринт ИЯИ РАН 1189/2007, М.2007.

Кузнецов Валерий Леонидович, с.н.с., к.ф.-м.н.
117312, Москва, пр-т 60-летия Октября, д.7а
Тел.: 8(496)7510712; Факс: 8(496)7510711; E-mail: kuvale@gmail.com

ИСПЫТАНИЯ ПРОТОТИПА УСТАНОВКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ НЕ СОХРАНЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ЧЕТНОСТИ В ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

Е.В. Кузнецова, В.Л. Кузнецов, А.И. Берлев

Институт ядерных исследований РАН

В работах [1,2] было показано, что в случае динамической дифракции нейтронов по Лауэ в совершенном монокристалле, может быть существенное увеличение величины пространственно-нечетных эффектов (ПНЭ). В ^{81}Br существует низколежащий ρ - резонанс (0.88 эВ), в котором величина P - нечетной асимметрии полного сечения достигает величины $2.4 \cdot 10^{-2}$. Представляет интерес выполнить исследования не сохранения пространственной четности в дифракции нейтронов на монокристалле KBr в окрестности ρ – волнового резонанса ^{81}Br с целью проверки предсказаний работ [1,2,3].

В ноябрьском сеансе 2010 года состоялся пуск модернизированного импульсного источника нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН. Испытания установки для исследования не сохранения пространственной четности в дифракции нейтронов (НПЧД) были выполнены на канале № 8 ИН-06. Параметры протонного пучка были следующие: длительность импульса протонного пучка ~ 90 мкс, энергия протонов 209 МэВ, импульсный ток $\sim(4\div 6)$ мА, частота повторения 1 Гц (большую часть времени), 10 Гц, 25 Гц и 50 Гц в течение нескольких часов. Показано, что детектирующая система и системы управления гониометрами и спектрометром работают удовлетворительно. Определено количество нейтронов с длиной волны соответствующей максимуму спектра нейтронов ИН-06 и количество нейтронов с длиной волны соответствующей резонансу ядра ^{81}Br , после дифракции от монокристалла бромида калия. Фоновый счет в области ρ - резонанса $^{81}\text{Br} < 7 \cdot 10^{-3}$. Сделаны оценки мозаичности монокристалла ($10'' \leq \Delta\theta_m \leq 40''$) и возможности проведения эксперимента по исследованию не сохранения пространственной четности в дифракции нейтронов на монокристалле бромида калия на импульсных источниках нейтронов ИЯИ РАН.

1. Зарецкий Д.Ф., Сироткин В.К., ЯФ, т.40, стр.1256, (1984).
2. Барышевский В.Г., Черепица С.В., Вестник Белорусского Унив., сер.1(1), стр.3, (1986).
3. Каган Ю., Афанасьев А.М., ЖЭТФ, т.50, вып.1, с. 271, (1966).

Кузнецова Евгения Васильевна, с.н.с., к.ф.-м.н.
117312, Москва, пр-т 60-летия Октября, д.7а
Тел.: 8(496)7510714; Факс: 8(496)7510711; E-mail: evgenia@inr.ru

НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР-МАЛОУГЛОВОЙ ДИФРАКТОМЕТР ГОРИЗОНТ НА ИМПУЛЬСНОМ ИСТОЧНИКЕ ИН-06: РЕЗУЛЬТАТЫ ИСПЫТАНИЙ

В. С. Литвин¹⁾, А. П. Булкин²⁾, В. А. Трунов²⁾, С. И. Калинин²⁾,
В. А. Ульянов²⁾, А. А. Столяров¹⁾, Р. А. Садыков¹⁾, Э. А. Коптелов¹⁾

¹⁾*Институт ядерных исследований РАН, Москва*

²⁾*Петербургский Институт ядерной физики, Гатчина*

На импульсном испарительном (spallation) источнике нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН (г. Троицк) был смонтирован и испытан времяпролетный нейтронный рефлектометр «Горизонт». Отличительной особенностью установки является вертикальная плоскость рассеяния нейтронов, благодаря которой возможно исследование методом нейтронной рефлектометрии поверхностей и границ раздела жидкостей. Также установка позволяет исследовать структуру вещества методом малоуглового рассеяния нейтронов.

Установка состоит из зеркального изогнутого нейтроновода, двух автоматизированных коллимирующих щелевых устройств, отклоняющего суперзеркала, виброустойчивого узла образца и консоли с детектором нейтронов. Нейтроновод имеет канал длиной 7 м, образованный суперзеркалами NiMo/Ti с $m=2$, изогнутый в вертикальной плоскости, с радиусом кривизны 520 м. Нейтроновод обеспечивает увеличение плотности потока тепловых и холодных нейтронов на образце и задерживает нейтроны с длиной волны менее 1 Å. Угол падения пучка нейтронов на образец может изменяться с помощью отклоняющего суперзеркала NiMo/TiZr с $m=2$. Планируется оснащение установки двухкоординатным детектором нейтронов, который позволит наблюдать анизотропию малоуглового рассеяния, а также малоугловое рассеяние при скользящих углах (GISANS). Установка может быть оснащена зеркалом-поляризатором, анализатором поляризации и спин-флипперами для рефлектометрии на поляризованных нейтронах.

В ноябре 2010 г. был произведен пуск источника и получены спектры прямого пучка в позиции образца с отклоняющим суперзеркалом и без него, а также расходимость пучка, падающего на образец. Максимум спектра нейтронов на выходе нейтроновода приходится на 2 Å, а расходимость пучка при ширине коллимирующих щелей 10 мм — 0,2°. Данные значения соответствуют расчетным, полученным из модельных расчетов с помощью программы VITESS.

Литвин Василий Сергеевич, м.н.с.

117312, Москва, просп. 60-летия Октября, 7а. Институт ядерных исследований РАН

Тел.: 8(496)7510191; Факс: 8(496)7510712; E-mail: vlitvin@inr.ru

**РФЭС СИСТЕМЫ *THERMO SCIENTIFIC* ПОСЛЕДНЕГО ПОКОЛЕНИЯ.
ПОТЕНЦИАЛ И ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ,
ПЛЕНОК И ПОКРЫТИЙ**

В.С. Неудачина

Московское представительство Intertech Corporation, г. Москва

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС, XPS) на сегодняшний день является одним из наиболее востребованных методов анализа материалов с различной структурой и физико-химическими свойствами. Значительный интерес представляет использование данного метода для неразрушающего анализа наноразмерных пленок, материалов и покрытий, что позволяет получить сведения о качественном и количественном составе поверхности, распределении элементов по поверхности (картирование, получение изображений) и глубине (профилирование). Недавно был разработан уникальный инструмент для неразрушающего исследования сверхтонких пленок, покрытий, а также различных наноразмерных объектов - рентгеновский фотоэлектронный спектрометр ThetaProbe (производство компании Thermo Scientific, Великобритания), который оснащен двухкоординатным детектором специальной конструкции и позволяет проводить анализ угловой зависимости фотоэмиссии в параллельном режиме. Данный аналитический комплекс сочетает в себе легкость использования и быстроту анализа любых образцов, включая диэлектрики, за счет высокой степени автоматизации, удобного в обращении программного обеспечения Avantage и специальной системы нейтрализации подзарядки поверхности. Размеры системы позволяют проводить неразрушающий анализ как небольших, так и крупных образцов (например, кремниевых пластин диаметром 100 мм).



В докладе будут рассмотрены основные особенности конструкции РФЭС спектрометра ThetaProbe, его энергоанализатора и детектора, а также примеры практического применения спектрометра (анализ полимерных покрытий, полупроводниковых сверхтонких пленок и гетероструктур, самособирающихся нанослоев, модификация поверхности наноматериалов и т.д.).

В докладе будут рассмотрены основные особенности конструкции РФЭС спектрометра ThetaProbe, его энергоанализатора и детектора, а также примеры практического применения спектрометра (анализ полимерных покрытий, полупроводниковых сверхтонких пленок и гетероструктур, самособирающихся нанослоев, модификация поверхности наноматериалов и т.д.).

Неудачина Вера Сергеевна, к.х.н., специалист по оборудованию для анализа поверхности
119333 г. Москва, Ленинский проспект, д. 55/1, стр. 2,
Тел.: (495)232-42-25; Факс: (495)232-42-25 доб. 0; E-mail vsn@intertech-corp.ru

СТАНЦИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ "КОСМОС": АППАРАТНО - МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ РАБОТ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ И ВУФ ДИАПАЗОНАХ

А.Д.Николенко^{*}, А.В. Горловой, Д.В. Ивлиушкин, А.А.Легкодымов, В.В.Лях, М.Р.Машковцев, В.Ф.Пиндюрин, Н.С. Шадрин

Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Метрологическая станция «Космос» функционирует с 2007 года в Сибирском международном центре синхротронного излучения на сверхвысоковакуумном канале № 10 вывода СИ из накопителя ВЭПП-4. Назначение станции - разработка и реализация метрологических методик в мягком рентгеновском диапазоне (80-2000 эВ) и диапазоне вакуумного ультрафиолета (10-100 эВ). Станция оснащена рентгеновским монохроматором на основе многослойных зеркал и решеточным монохроматором для работ в ВУФ диапазоне. Как показала практика, наиболее востребованными являются работы по спектральной калибровке различного рода детекторов. На станции разработан и реализован на практике ряд методик калибровки спектральной чувствительности детекторов в мягком рентгеновском диапазоне (метод эталонного детектора, метод селективных фильтров, метод самокалибровки). Также на станции ведутся работы по исследованию деградации детекторов под действием радиации и измерению их зонных характеристик. Исследования качества рентгеновской оптики представлены работами по калибровке коэффициентов отражения зеркал и кристаллов. Двухкоординатный детектор, которым оснащена станция, позволяет исследовать морфологию пучка СИ после его прохождения через оптические элементы, и, таким образом, аттестовать качество их поверхности. Экспериментальный объем станции позволяет размещать в нем исследуемые объекты с габаритными размерами порядка 0.5 м и проводить калибровку различного рода аппаратуры (например, спектрометров космического базирования) как единого целого.

^{*} **Николенко Антон Дмитриевич**

630090, Новосибирск, Просп. Лаврентьева, 11, Институт ядерной физики СО РАН
E-mail: A.D.Nikolenko@inp.nsk.su, Тел.: +7(383)3394347, Факс: +7(383)3342163

МНОГОМОДОВАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ТОМОГРАФИЯ НА СТАНЦИИ «МЕДИАНА» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

К.М.Подурец, Д.К.Погорелый, А.А.Калоян, Е.С.Коваленко, В.Г.Кон

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Рентгеновская томография как метод получения трехмерных изображений объекта широко используется в различных областях исследований, таких как неразрушающий контроль изделий, биология и медицина, минералогия и палеонтология, и другие. Томографическая съемка заключается в регистрации с помощью координатного детектора серии картин пропускания при повороте объекта и последующего математического восстановления строения объекта. В рентгеновской томографии всегда возникает задача выбора оптимальных условий съемки, таких как пространственное разрешение, поле зрения, энергия излучения, а также применения фазочувствительных методов для усиления контраста. Проведение измерений на синхротронном излучении позволяет в широких пределах варьировать условия съемки благодаря непрерывному спектру, высокой яркости и коллимации пучка. В данной работе описаны возможности многомодовой рентгеновской томографии на станции «Медиана» Курчатовского источника синхротронного излучения, включающие в себя томографию и микротомографию на белом и «розовом» пучках, съемку на монохроматическом пучке, а также съемку с применением осевого и рефракционного фазоконтрастных методов. Приводятся результаты, полученные для объектов разного типа в разных условиях съемки.

Подурец Константин Михайлович, д.ф.-м.н.
123182 Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.
Тел.: 8(499)1967351; E-mail: podurets@yandex.ru

МУАР–МАЯТНИКОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СОВЕРШЕННЫХ ИНТЕРФЕРОМЕТРАХ

Н. Д. Раранский, В. Н. Балазюк, Н. И. Мельник, В. П. Шафранюк

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича, Черновцы, Украина

Для исследования угловых и спектральных характеристик пучков необходимо изготовить интерферометр, отвечающий идеальной геометрии. Во избежание появления структурных муаровых полос количество примесных атомов не должно превышать 10^{14} – 10^{16} ат/см³. Естественно, что таким требованиям могут отвечать только отдельные бездислокационные монокристаллы, выращенные методом электронно-лучевой зонной плавки. Трехкристальный L-L-L интерферометр был изготовлен из монокристалла Si. Анализатор интерферометра изготовлен в виде клина, ребро которого параллельно направлению [110]. Для получения муаровых полос в одно из плеч интерферометра вводился клин из плексигласа, угол которого подбирался таким образом, чтобы периоды возникающих фазовых муаровых полос были равны периодам маятниковых полос от клиновидного анализатора. На рис. 1а представлена интерферограмма, полученная в CuK_α -излучении от плоскостей (220). Фазовые муаровые полосы ориентированы параллельно отражающим плоскостям. В тонкой части анализатора наблюдаются также и маятниковые полосы, период которых $\Lambda=17$ мкм. Одновременное появление маятниковых и муаровых полос приводит к возникновению осцилляций электромагнитного поля, названные нами эффектом муар-маятникового взаимодействия.

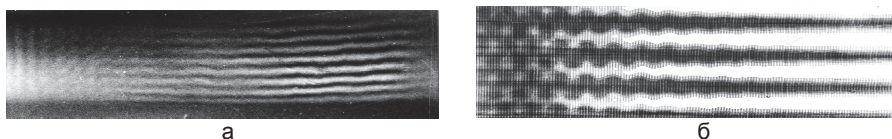


Рис. 1. Муар-маятниковое взаимодействие: а) экспериментальная интерферограмма б) расчетная интерферограмма.

Отметим, что с увеличением толщины кристалла-анализатора маятниковые осцилляции исчезают и наблюдаются только муаровые полосы.

На рис.1б представлена расчётная интерферограмма. Наблюдается удовлетворительное согласие расчётных и экспериментальных интерферограмм.

Раранский Николай Дмитриевич, профессор
58012, Черновцы, Украина, ул. Коцюбинского, 2
Тел.: (0372)544400; E-mail: fft2010@bigmir.net

СТАНЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ И МИКРОТОМОГРАФИИ (РТ-МТ) КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИ – ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Р.А.Сенин¹⁾, А.С.Хлебников¹⁾, К.В.Анохин^{1,2)}, О.И.Ефимова^{1,2)}, И.А.Блинов¹⁾,
А.О.Голубицкий¹⁾, А.В.Бузмаков³⁾

¹⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²⁾ НИИ нормальной физиологии им. П.К.Анохина РАМН, Москва

³⁾ Институт Кристаллографии РАН, Москва

Практика работы на станции РТ-МТ НБИК центра НИЦ «Курчатовский институт» выявила ряд существенных проблем.

С целью увеличения стабильности параметров станции, сокращения времени получения необходимого набора изображений и мобильности в работе с разными детекторами схема станции претерпела существенные изменения. В новом варианте используется только один кристалл-монокроматор и три самостоятельных набора гониометров и детекторов.

Плоский СИ, имеющий в области монокроматора ширину около 60 мм, разветвляется на три независимых потока (см. Рис.1). Центральная часть «белого» пучка проходит без изменения своей спектральной плотности до детектора с пространственным разрешением 40 мкм. Правая или левая часть исходного пучка отклоняется в сторону единственным кристаллом, атомные плоскости которого расположены вертикально. На каждом из полученных дифрагированных пучков стационарно установлен свой гониометр и детектор (2.5 мкм, поле 0.8x0.8 мм² и 10 мкм, поле 10x10 мм²).

Для интеграции оборудования использовалась система управления TANGO.

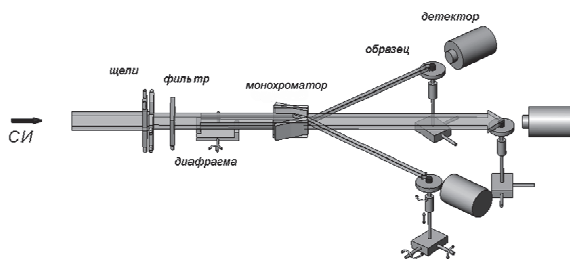
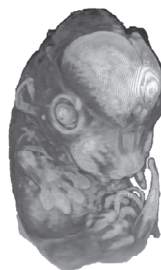


Схема станции рентгеновской микротомографии



Двухнедельный эмбрион
мыши, окрашенный йодом

Сенин Роман Алексеевич, к.ф.-м.н.
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1
Тел.: 8(499)1967460; E-mail: senin_ra@rcki.ru

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ КОМПЛЕКС КАК УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ СТРУКТУР

Д.И.Смирнов¹⁾, Н.Н.Герасименко¹⁾, А.Г.Турьянский²⁾, Н.А.Медетов¹⁾

¹⁾ *Московский государственный институт электронной техники, Москва, Зеленоград*

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

В докладе обсуждается опыт эксплуатации экспериментального рентгеновского измерительного комплекса “X-Ray MiniLab”, разработанного в ФИАН им. П.Н.Лебедева совместно с ООО «Институт рентгеновской оптики».

Предлагаемые конструктивные решения позволяют рассматривать “X-Ray MiniLab” как комплекс рентгеновских исследовательских методик, обладающий уникальным сочетанием аналитических возможностей для неразрушающего экспресс-контроля различных наноструктур и матриц с наноразмерными включениями или нанометровыми слоями [1]. Запатентованная рентгенооптическая схема прибора обеспечивает параллельные измерения данных на нескольких спектральных линиях.

В комплекс измерительных методик входят рентгенофлуоресценный элементный анализ, рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ, а также анализ ультрадисперсных систем методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Впервые для практического применения предлагаются режимы относительной рентгеновской рефлектометрии и рефрактометрии. В частности, «X-Ray MiniLab” позволяет получать уникальные результаты при исследовании многослойных структур рентгеновских зеркал, микропористых материалов и наноразмерных кластеров, полученных ионной имплантацией.

В докладе подробно обсуждаются и иллюстрируются как преимущества, так и ограничения использования измерительных методик на базе одного прибора.

1. Турьянский А.Г., Герасименко Н.Н., Пиршин И.В., Сенков В.М. // Наноиндустрия, 2009. – № 5 (17). – С. 40–43.

ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩИЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ МИКРОСКОП ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

И. Снигирева, А. Снигирев

Европейский Центр Синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция.

Предложена новая концепция высокоразрешающего рентгеновского микроскопа на основе преломляющей оптики, позволяющая получать диракционную картину и реальное изображение структуры в одной экспериментальной схеме. Методологически предложенный микроскоп является аналогом высокоразрешающего просвечивающего электронного микроскопа для изучения кристаллов с атомарным разрешением.

Экспериментально микроскоп был реализован на ондуляторной станции ID06 (ESRF) с использованием энергии фотонов 10-20 кэВ. В качестве конденсора и объектива были использованы бериллиевые параболические рефракционные линзы. Конденсор использовался как для когерентного освещения в изображающей моде, так и для Фурье-преобразования в режиме малоугловой дифракции. Изображение с пространственным разрешением ~100 нм формировалось объективом с переменным фокусным расстоянием в пределах 10-50 см. Микроскоп был использован для исследования мезоскопических структур таких как натуральные и искусственные опалы, и инвертированные фотонные кристаллы.

Предлагаемая схема микроскопии не ограничивается двумерными изображениями и позволяет получать трехмерные томографические изображения в реальном и обратном пространстве. Высокая яркость синхротронного света наряду с современными детекторами позволяет применить предлагаемую методику для изучения временных процессов. Исследование структуры фотонных кристаллов *in-situ* - в процессе роста рассматривается как одно из приоритетных направлений данного микроскопа.

Ирина Снигирева, к.ф.-м.н.

ESRF, B.P. 220, rue Jules Horowitz, 38043 Grenoble, France

Тел.: (33)476882360; Факс: (33)476882542; E-mail: irina@esrf

РЕНТГЕНОВСКИЙ ФОТОЭФФЕКТ: НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ ТАРГЕТНОЙ БЕЗРАДИОНУКЛИДНОЙ БРАХИТЕРАПИИ

Е.А. Созонтов¹⁾, В.В. Сафронов²⁾, Г. Гутман³⁾

¹⁾ НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

²⁾ Филиал Института кристаллографии РАН, Калуга, Россия

³⁾ Лаборатория передовой рентгеновской технологии, Детройт, США

Регистрация и анализ выхода вторичных процессов: флуоресцентного излучения, фото- и Оже-электронов при фотоэлектрическом поглощении рентгеновского излучения в условиях формирования в кристалле стоячей рентгеновской волны, позволяет полностью решить задачу спектроскопической характеристики примесных атомов и их локализации в кристаллической решетке с субангстремной точностью [см., например 1,2].

Основная цель и мотивация данной работы – разработка нового подхода, аппаратуры и метода, основанного на использовании квазимонохроматического рентгеновского флуоресцентного излучения генерируемого вторичной мишенью встроенной в зонд, который может быть малоинвазивно введен в биологическую ткань. Первые эксперименты [3-5] продемонстрировали принципиальную возможность использования этого подхода для таргетной безрадионуклидной брахитерапии. Данный метод может быть эффективным инструментом в радиационной биологии и медицине для таргетного внутритканевого облучения новообразований, в том числе для интраоперационных лучевых воздействий и является основой для создания новой платформы высокотехнологичной медицины – безрадионуклидной рентгеновской брахитерапии.

1. М. В. Ковальчук, В. Г. Кон. УФН, **149** (1986) 69
2. I. A. Vartanyants and M. V. Kovalchuk . Rep. Prog. Phys., **64** (2001)1009
3. E. Sozontov, V.Safronov, Y.Liu. Proceedings of the 6-th Russian-Bavarian Conference on Bio-Medical Engineering. P. 114-118, (2010), Moscow
4. Y. Liu, E. Sozontov, V. Safronov et al. J. of Physics: Conf. Series **250** (2010) 012069
5. G. Gutman, E. Strumban, E. Sozontov, K. Jenrow. Phys. Med. Biol. **52** (2007) 1757

Созонтов Евгений Аркадьевич
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
Тел.: 8(499)1967268; E-mail: esozontov@yahoo.com

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ ДИФРАКЦИОННОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ

Э.В.Суворов, И.А.Смирнова

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

Методами численного моделирования и экспериментальной секционной топографии исследованы закономерности дифракции рентгеновского излучения в тонком кристалле для случая, когда ось дислокации располагается параллельно вектору дифракции. Рассмотрен случай винтовых дислокаций с большой дифракционной мощностью, когда $(\mathbf{gb}) > 10$. Изучено образование тонкой структуры дифракционного изображения дислокаций. Ранее нами было показано, что одним из основных механизмов образования «прямого изображения» является рассеяние волнового поля на псевдо границе кристалла вблизи оси дислокации, где локальная область кристалла за счет сильных искажений выходит из отражающего положения. При больших дифракционных мощностях упругого поля размеры переходной области кристаллической решетки (толщина псевдо границы), где локальная область кристалла выходит из отражающего положения, могут достигать десятков микрон. Учитывая, что волновое поле внутри треугольника рассеяния имеет сложный характер, и максимумы интенсивности поля имеют вид гипербол, становится понятно, что чем больше толщина псевдо границы, разделяющей «хороший кристалл» и искаженный, (т.е. размеры области, вышедшей из отражающего положения), тем больше будет отраженных в брэгговском направлении лучей, участвующих в формировании прямого изображения. Понятно, что в этом случае прямое изображение является результатом интерференции множества вторичных волн, возникших на псевдо границе области, вышедшей из отражающего положения и возникает тонкая структура изображения.

Эрнест Витальевич Суворов, профессор, д.ф.-м.н.
142432 Черноголовка, МО, ул. Академика Ю.А.Осипяна д.2, ИФТТ РАН
Tel: 8(496)5222960; E-mail: suvorov@issp.ac.ru

2θ-СКАНИРОВАНИЕ С ДВУМЕРНЫМ ДЕТЕКТОРОМ В ГЕОМЕТРИИ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА НА ПУЧКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.Н. Сульянов^{1,2)}, Н. Boysen³⁾, С. Paulmann⁴⁾, А.А. Русаков¹⁾,
Е.А. Сульянова¹⁾, А.А. Гогин^{1,5)}

¹⁾ *Институт кристаллографии РАН, г. Москва, Россия*

²⁾ *Курчатовский Центр СИиНТ, г. Москва, Россия*

³⁾ *Университет LMU Muenchen, Garching, Германия*

⁴⁾ *University Hamburg, c/o HASYLAB/DESY, Германия*

⁵⁾ *Московский университет, физический факультет, г. Москва, Россия*

При регистрации порошковой рентгенограммы в телесном угле, определяемом двумерным детектором, и расчёте зависимости $I(2\theta)$ (интенсивность - угол дифракции) может быть получена высокая статистическая точность результатов. Систематические ошибки, связанные с конусностью (асимметрия линий и искажения интенсивности при углах дифракции, отличных от $2\theta=90^\circ$), устраняются. Сканирование с двумерным детектором по 2θ позволяет проводить сбор данных до больших величин $\sin\theta/\lambda$. Рассмотрены поправки для учета в каждой точке детектора наклонного падения, поляризации, поглощения в образце (для любого направления выхода излучения из цилиндра), чтобы зависимости $I(2\theta)$ были рассчитаны со стандартным угловым множителем. Исходные двумерные картины получены на станции F1 (HASYLAB, г. Гамбург), детектор MAR CCD, 2048x2048 пикселей. Тестирование проведено на эталонах NIST Si и Al₂O₃. При уточнении по методу Ритфельда брэгговские пики представлены симметричными функциями pseudo-Voigt. Получены брэгговские факторы расходимости в пределах 1.3%. Разностные синтезы Фурье показали остаточную электронную плотность на уровне примерно $0.05 \text{ e}/\text{\AA}^3$.

1. Sulyanov S., Boysen H., Paulmann C., Sulyanova E., Rusakov A. (2011) Z. Krist. (в печати).

Сульянов Сергей Николаевич

119333, Москва, Ленинский просп., 59, Институт кристаллографии РАН

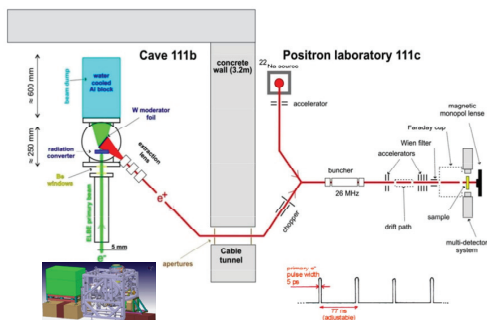
Тел.: 8(499)1356230, Факс: 8(499)1351011, E-mail: sul942@yandex.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПОЗИТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Д.А. Тлисов, А.С. Белов, А.И. Берлев, С.Н. Гниненко, Н.А. Голубев, А.В. Дерменев, Р.М. Джилкибаев, М.М. Кирсанов, А.Е. Корнеев, Н.В. Красников, В.А. Матвеев, В.С. Пантуев, А.С. Пашеньков, Н.А. Тито

Институт ядерных исследований РАН, Москва

Новый технологический комплекс позитронной аннигиляционной спектроскопии для неразрушительного контроля и исследования наноструктурных материалов, используемых в микроэлектронной, химической, авиационной и других отраслях отечественной индустрии позволит проводить изучение, диагностику, анализ и контроль присутствующих в этих материалах дефектов, их размеры (0,1 - 10 нм) и концентрацию (10^{-4} – 10 %) в зависимости от их глубины залегания в образце (0,1 нм – 10 мм). Основу проекта составляет высокоэффективный импульсный пучок медленных позитронов, оборудованный специально разработанной многоцелевой установкой (см. рисунок ниже). В качестве источников позитронов могут быть использованы как радиоизотоп ^{22}Na так и генерация позитронов с помощью высокоинтенсивных пучков электронов с сравнительно небольшой энергией порядка 10 МэВ. В этом случае пучок первичных позитронов формируется в мишенной станции, охлаждается и транспортируется в экспериментальный зал для проведения измерений на нескольких каналах. Данные затем поступают для анализа и обработки.



Тлисов Данила Анатольевич, к.ф.-м.н.
117312, Москва, В-312, проспект 60-летия октября, 7а
Тел.: 8(926)2788334; Факс: 8(499)1352268; E-mail: tliov-danila@yandex.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «ДЕТОНАЦИЯ» СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 100-ПОЛЮСНОГО СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ВИГГЛЕРА НАКОПИТЕЛЯ ВЭПП-4

Б.П.Толочко¹⁾, И.Л.Жогин¹⁾, Н.А.Мезенцев²⁾, Е.Б.Левичев²⁾, Г.Н.Кулипанов²⁾, В.М.Аульченко²⁾, К.А.Тен³⁾

¹⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск*

³⁾ *Институт гидродинамики СО РАН, Новосибирск*

Станция разрабатывается для исследования в реальном времени (in situ) протекания физико-химических процессов в зоне химической реакции детонирующих взрывчаток диаметром до 70 мм и массой до 200 г (тротилловый эквивалент) методами микротомографии, малоуглового рассеяния, скоростной рентгеновской дифракции и рентгеновской спектроскопии.

В настоящее время исследование детонации проводится на станции «ВЗРЫВ» накопителя ВЭПП-3 [1], где спектр излучения «мягкий» и не позволяет исследовать образцы диаметром более 15 мм. Поэтому проводятся эксперименты на модельных объектах, отличающихся масштабом от «реальных», используемых в промышленности и современном оружии зарядов. Однако, как было показано ранее [2], масштабирование и использование оболочек приводит к изменению физико-химических процессов в зоне химической реакции детонационного процесса. Поэтому эксперименты на модельных объектах дают искаженное представление о процессах в «реальных» объектах. На новой установке это ограничение снимается за счет смещения спектра в жесткую область.

Ожидаемый поток фотонов на детекторе DIMEX после прохождения взрывчатки толщиной 50 мм и бериллиевых окон взрывной камеры составляет 10^{15} фотон/мм²/сек, или 10^9 фотон/мм²/банч, что вполне достаточно для проведения запланированных экспериментов.

Литература

1. <http://ssrc.inp.nsk.su/CKP/stations/passport/0b/>
2. Titiv V.M., Tolochko B.P., et al. Diamond and related materials, 2007, 16, p. 2009.

Толочко Борис Петрович, д.х.н.

630128, Новосибирск, ул.Кутателадзе, д.18

Тел.: (383)329-41-05; Факс: (383)339-28-47; E-mail: tolochko@inp.nsk.su

ДИСПЕРСИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ МОНОХРОМАТОРОВ ИЗ ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ГРАФИТА

А.Г. Турьянский, И.В. Пиршин

*Учреждение Российской академии наук Физический институт
им. П.Н. Лебедева РАН*

Исследованы дисперсионные характеристики пленочных рентгеновских монохроматоров из пиролитического графита (ПГ) толщиной 6÷50 мкм. Использовались образцы структурно совершенного ПГ типа HAPG (Optigraph GmbH), разработанного для рентгеновской спектроскопии высокого разрешения, и стандартные образцы типа HOPG, применяемые для изготовления монохроматоров. Пленочные образцы ПГ наносились на оптически гладкие подложки боросиликатного стекла.

Показано, что размер области когерентности D в направлении $[100]$ для материала типа HAPG достигает ≥ 1 мкм. При этом в диапазоне углов разворота блоков графита до $2\Delta\omega$, где $\Delta\omega$ угол мозаичности текстуры ПГ, параметр D практически не изменяется. Это обеспечивает возможность измерения эмиссионных спектров и тонкой структуры спектров поглощения по единичным рентгеновским импульсам. Обоснованы условия регистрации спектров в полосе шириной ~ 1 кэВ, включающей области XAFS и NEXAFS и показана возможность параллельных измерений в нескольких полосах рентгеновского спектра. Предложена конструкция дисперсионного элемента на базе структуры алмаз-пирографит-алмаз для регистрации спектров при сверхвысоких радиационных нагрузках, создаваемых рентгеновским лазером на свободных электронах.

Турьянский Александр Георгиевич, д.ф.-м.н.
119991, Москва, Ленинский просп. д.53
Тел.: 8(499)1326268; E-mail: tour@sci.lebedev.ru

**ПАРАМЕТРЫ ИСТОЧНИКОВ СИ ДЛЯ СТАНЦИЙ РЕТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА С
ФОКУСИРОВКОЙ ПУЧКА В ВЕРТИКАЛЬНОЙ И ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПЛОСКОСТЯХ
СТАНЦИЙ НА НАКОПИТЕЛЕ «СИБИРЬ-2»**

Д.М.Хейкер^{1,2)}, В.Н.Корчуганов²⁾, Е.Е.Коноплев³⁾, Д.С.Молоденский¹⁾,
П.В.Дороватовский¹⁾, А.А.Кузнецов¹⁾

¹⁾ ИК РАН, Москва

²⁾ НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

³⁾ НПО «Луч», Подольск

Расчеты проведены для двух станций: станции для белковой кристаллографии «Белок» на пучке из поворотного магнита, станции для рентгеноструктурного анализа на монокристаллах и порошках «РСА» на боковом пучке ($\alpha = 17$ мрад) из сверхпроводящего вигглера (19 полюсов). Применение сфокусированного синхротронного излучения с высокой величиной плотности потока пучка, падающего на образец в совокупности с двумерным детектором позволяет сократить время получения дифракционной картины, улучшить угловое разрешение, увеличить чувствительность к измерению деталей картины с малой интенсивностью, уменьшить используемый спектральный интервал, уменьшить интенсивность гармоник. В результате оказывается возможным исследовать структуру малых монокристаллов, включая нанокристаллы, исследовать модулированные структуры, кластеры в монокристаллах, ускоренно с большой точностью и чувствительностью решать задачи по исследованию структуры поликристаллических материалов.

Ниже приведены величины спектрального потока фотонов с длиной волны $\lambda = 1\text{ \AA}$, падающего на образец диаметром 0.3 мм – N фот / с·0.1% $\Delta\lambda/\lambda$. $1.3 \cdot 10^{11}$ («Белок»); $2.2 \cdot 10^{11}$ («РСА»); $\cdot 10^{12}$ и 10^{13} (Белок-2 А и В).

Параметры станции для белковой кристаллографии «Белок-2» на центральном пучке из сверхпроводящего вигглера (69 полюсов) взяты из проекта станции «Белок-2», включающего двухкристальный монохроматор на основе Si(111) и многослойных зеркал (А и В соответственно). (Г.П.Буренков EMBL/DESY, Гамбург, Германия, А.Н.Попов ESRF, Гренобль, Франция и др)

Хейкер Даниэль Моисеевич, профессор
119333, Москва, Ленинский пр., д.59
Тел.: 8(499)1356230; E-mail: kheiker@ns.crys.ras.ru

КОординатный ДИТЕКТОР ОД-4 С БОльшой УГЛОВОЙ АПЕРТУРОЙ ДЛя ДИФРАКЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ С ВЫСОКИМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Л.И.Шехтман^{1),3)}, В.М.Аульченко^{1),3)}, В.В.Жуланов^{1),3)}, П.А.Папушев¹⁾, В.М.Титов¹⁾,
Б.П.Толочко²⁾, М.Р.Шарафутдинов²⁾

¹⁾ *Институт ядерной физики им.Будкера СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,
Новосибирск*

³⁾ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

В Институте ядерной физики СО РАН разрабатывается детектор высокого разрешения с большой угловой апертурой на основе многокаскадного газового электронного умножителя (ОД4), который должен обладать следующими параметрами:

1) широкий угловой интервал регистрации (до 180 градусов) для одновременного сбора информации от всех рефлексов;

2) в режиме быстрой съемки угловое разрешение должно быть не хуже 0.1 градуса для рентгеновского излучения с энергией до 10 кэВ. При прецизионной съемке может быть достигнуто угловое разрешение ~0.001 градуса. Такое разрешение достигается постановкой перед детектором решетки из узких щелей, изготовленных литографическим методом и последующим сканированием этой решеткой в пределах апертуры канала;

3) возможность регистрации изображений в режиме «кино» с длительностью кадра 1 мкс;

4) быстродействие должно составлять не менее 10^5 фотонов/канал/с;

5) эффективность регистрации при энергии рентгеновского излучения до 10 кэВ - не менее 30%.

Первый вариант детектора имеет апертуру 67 градусов, фокусное расстояние 350 мм, 2048 каналов с шагом 0.2 мм со стороны входного окна (~0.04 град.). Измерения, проведенные на прототипе детектора, оснащенного электроникой только в центральной части, показали, что пространственное разрешение при атмосферном давлении рабочей смеси (Ar-CO₂ (3-1)) составляет 0.48 мм (ШПВ, 0.09 град.), а быстродействие превышает 200 кГц/кан. Измерения проведены на пучке фотонов с энергией 8 кэВ. В настоящее время ведется разработка компонентов окончательного варианта полноформатного детектора с учетом опыта, приобретенного при испытаниях прототипа.

Шехтман Лев Исаевич
630090 Новосибирск, просп.Лаврентьева 11, Институт ядерной физики им.Будкера СО РАН
Тел.: 8(383)3294992; Факс: 8(383)3307163; E-mail: L.I.Shehtman@inp.nsk.su

СОСТОЯНИЕ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ IN SITU В СИБИРСКОМ ЦЕНТРЕ СИ

А.Н.Шмаков^{1,2)}, М.Г.Иванов^{1,2)}, З.С.Винокуров²⁾, М.Р.Шарафутдинов³⁾,
Б.П.Толочко³⁾

¹⁾ *Институт катализа им.Г.К.Борескова СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

³⁾ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Исследования структурных изменений в материалах в условиях высоких температур и реакционных сред методами рентгеновской дифракции ведутся в Сибирском Центре Синхротронного и Терагерцового излучения на станции «Прецизионная Дифрактометрия», смонтированной на канале №6 вывода СИ накопителя электронов ВЭПП-3. Монохроматизация излучения осуществляется однократным отражением от кристалла-монохроматора (Ge(111), Si(111), Si(220)) с отклонением монохроматического пучка в вертикальной плоскости на угол 30.734° вверх. Соответствующие рабочие длины волн λ 0.1731, 0.16618 и 0.10176 нм. Дифрагированное излучение регистрируется позиционно-чувствительным детектором ОД-3М (ИЯФ СО РАН) с угловой дискретностью $\sim 0.01^\circ$ в диапазоне углов $2\theta=30^\circ$. Детектор позиционируется на требуемый угол прецизионным гониометром HUBER 480 (HUBER GmbH, Германия).

Станция оснащена рентгеновской высокотемпературной камерой НТК-2000 (Anton Paar, Австрия), позволяющей проводить исследования структуры материалов при температурах до 1400°C на воздухе или до 2000°C в вакууме до 10^{-5} мбар, и камерой-реактором ХРК-900 (Anton Paar, Австрия) для экспериментов в окислительных и восстановительных средах при температурах до 900°C и давлениях от 10^{-2} мбар до 10 бар. На станции имеется генератор водорода, обеспечивающий поток газа 5-7 мл/сек.

На станции выполнен ряд экспериментов по исследованию структурных изменений в образцах при различных внешних условиях:

1. Появление кислород-дефицитной фазы в кобальтите стронция, допированном железом и ниобием, при нагреве до 1200°C в вакууме;
2. Восстановление наночастиц меди из оксида CuO в токе водорода 2 мл/сек при температуре 160°C , протекающее в одну стадию в течение 1 мин;
3. Структурные изменения в интерметаллидных катализаторах на основе Ni_3Al в процессе углекислотной конверсии метана в синтез-газ при температуре 850°C ;
4. Структурные изменения в катализаторах синтеза углеродных нанотрубок и нановолокон на всех этапах активации и работы катализаторов.

Шмаков Александр Николаевич, к.ф.-м.н., с.н.с.

630090, Новосибирск, пр.Акад.Лаврентьева, д. 5

Тел.: (383)3269547; Факс: (385)3308056; E-mail: A.N.Shmakov@inp.nsk.su

СЕКЦИЯ VI

Аппаратурно-методическое
обеспечение эксперимента

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА АСФАЛЬТЕНОВ МЕТОДОМ ПОРОШКОВОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

И.М.Абдрафикова¹⁾, Г.П.Каюкова²⁾, А.Т.Губайдуллин²⁾

¹⁾НИУ Казанский государственный технологический университет, г.Казань,

²⁾ Институт органической и физической химии КазНЦ РАН, г. Казань

Характеристика асфальтенов всегда была предметом многих исследований, но изучение их проводилось, главным образом, с точки зрения их химической структуры и, в меньшей степени, внимание исследователей обращалось на их фракционирование и характеристику полученных фракций. Тем не менее, в ряде последних работ показано, что состав асфальтенов далеко неоднороден и фракции, выделенные из асфальтенов системой растворителей с возрастающими значениями полярности, отличаются молекулярной массой, содержанием металлов, растворимостью и другими характеристиками их состава и свойств.

Целью работы было исследование асфальтенов и их фракций методом порошковой рентгеновской дифракции для выявления наличия в них кристаллических структур.

Асфальтены и продукты их фракционирования в ходе данной работы исследовали с применением порошковой рентгеновской дифракции на автоматическом рентгеновском дифрактометре фирмы «Bruker D8 Advance», оборудованном приставкой Vagö и линейным координатным детектором Vantec.

В результате исследований установлено, что в структуре асфальтенов из природных битумов Татарстана присутствует ассоциированная с ними углеводородная фракция, включающая кристаллы парафинов с общей формулой $(\text{C}_n\text{H}_{2n})_n$, а также нерастворимая в органических растворителях органоминеральная фракция, содержащая кристаллические структуры, характерные для минералов. Сделано предположение о том, что минералы могут служить зародышевой фазой при формировании ассоциатов асфальтенов в дисперсных битумных системах, что следует учитывать в процессах их добычи и переработки.

Абдрафикова Ильмира Маратовна
420015 г. Казань, ул. К. Маркса, дом 68
Тел.: 89179312884; Факс: (843)2731862; E-mail: nofretary@mail.ru, kayukova@iopc.knc.ru

ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ НА НЕЙТРОННОМ ДИФРАКТОМЕТРЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ «ГЕРКУЛЕС»

С.Н. Аксенов¹⁾, Р. А. Садыков^{1,2)}, Е.С. Клементьев^{1,3)},
А. П. Булкин⁴⁾, А. А. Алексеев¹⁾, В.С. Литвин¹⁾.

¹⁾Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия,

²⁾ИФВД РАН, Троицк, Россия

³⁾НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

⁴⁾ПИЯФ РАН, Гатчина, Россия

В докладе представлена нейтронографическая установка, позволяющая проводить измерения под давлением. Установка представляет собой герметичный сейф, внутри которого установлен пресс, позволяющий получать усилие более 200 тонн. На установке установлены дифракционные модули, и планируется установка модулей неупругого рассеяния нейтронов. Установка позволит проводить нейтронографические измерения на образце при давлении до 100 кбар, при размерах образца до 2 см³. Конструкция установки позволяет проводить измерения *in situ* процесса наводораживания при высоких давлениях и в широком диапазоне температур, получать рекордное давление для образцов объемом до 1 см², предоставляет возможность одновременного измерения структуры и динамики материалов.

Для увеличения плотности потока нейтронов, падающих на образец «под давлением» был установлен концентратор, который, благодаря «суперзеркалам», фокусирует нейтронный пучок на образец. Нейтронный концентратор позволяет увеличить интенсивность падающего на образец потока нейтронов в ~ 2 раза для нейтронов с $\lambda > 2,5$ Å. Так же в нейтроно-оптического тракт были установлены последовательно три коллиматора.

В ноябре 2010 года была запущена в действие установка «Геркулес». В качестве детектора был использован сектор из трех гелиевых счетчиков. В качестве тестовых образцов были измерены сталь, TiZr и карбонадо. Было проведено измерение нейтронного спектра прямого пучка, что дало возможность оценить выигрыш по плотности потока длинноволновых нейтронов при использовании нейтронного концентратора.

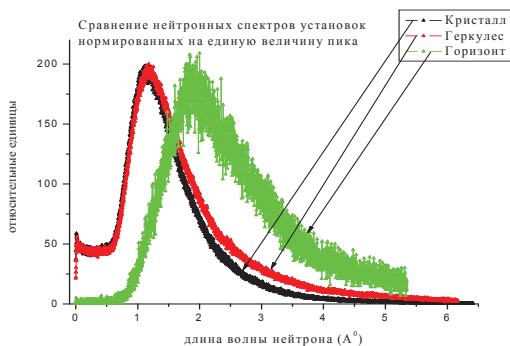
Аксенов Сергей Николаевич
117198, Москва, проспект 60-летия октября, 7а
Тел.: 8(496)7510191; Факс: 8(496)7510711; E-mail: axenov@inr.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ПРЯМОГО ПУЧКА НЕЙТРОНОВ УСТАНОВОК ИМПУЛЬСНОГО ИСТОЧНИКА ИН-06 ИЯИ РАН

А.А. Алексеев, В.С.Литвин, Р.А.Садыков, С.Н. Аксенов, А.И. Берлев, Э.А.Коптелов.

Институт ядерных исследований РАН

В ИЯИ РАН создан импульсный источник тепловых нейтронов ИН-06, предназначенный для исследований в области физики конденсированного состояния и наноструктур. В настоящее время он оснащен нейтронографическими установками 1-ой очереди и различными нейтроно-оптическими системами коллимации прямого пучка нейтронов - Горизонт (зеркальный нейтроновод), Кристалл (стальной коллиматор) и Геркулес (зеркальный концентратор). Для постановки экспериментов необходимо знать форму спектра в нейтронном канале каждой установки. Были произведены, время-пролётным методом, измерения спектров прямых пучков нейтронов установок на соответствующих каналах ИН-06. Ниже, на графике, приводятся спектры нейтронов прямого пучка трех различных установок. Видны различия в соответствии с особенностями систем коллимации (стальной коллиматор, зеркальный концентратор и зеркальный нейтроновод) прямого пучка нейтронов установок.



Измерения проводились счётчиком СНМ-20 наполненным газом BF_3 с обогащённым бором.

Алексеев Андрей Алексеевич, н.с.

142190, Россия, Московская область, г. Троицк, ул. Физическая, вл. 27.

Тел.: (496)3340191; E-mail: alexeev@jin.ru

**МЕТОДИКА ДИФРАКЦИИ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА В ГЕОМЕТРИИ «ОБРАТНОГО»
РАССЕЯНИЯ НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИ.
ЧАСТЬ I. ОЦЕНКИ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕТОДА.**

А.Н. Артемьев¹⁾, А.Д. Беляев¹⁾, Н.А. Артемьев²⁾, А.А. Демкив¹⁾, А.Г. Маевский¹⁾,
О.Ю. Горобцов¹⁾, Б.Ф. Кириллов¹⁾, С.И. Тютюнников³⁾, В.Н. Шаляпин³⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт, Москва*

²⁾ *Institut de Lumiere Extreme (ILE) ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, F-91761
Palaiseau Cedex, France*

³⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

На Курчатовском источнике СИ поставлена методика Дебая-Шеррера при дифракции в обратную полусферу. Показано, что чувствительность метода к относительному изменению межплоскостного расстояния более чем на два порядка превышает соответствующую чувствительность при дифракции в переднюю полусферу.

Обсуждаются требования к аппаратуре для экспериментов и математической обработке результатов.

**ДИФРАКЦИЯ ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА В ГЕОМЕТРИИ «ОБРАТНОГО» РАССЕЯНИЯ НА
КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИ.
ЧАСТЬ II. АППАРАТУРА, ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ,
ОБРАБОТКА.**

А.Д. Беляев¹⁾, А.Н. Артемьев¹⁾, Н.А. Артемьев²⁾, А.А. Демкив¹⁾, А.Г. Маевский¹⁾,
О.Ю. Горобцов¹⁾, Б.Ф. Кириллов¹⁾, Г.А. Князев¹⁾, С.И. Тютюнников³⁾, В.Н. Шаляпин³⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт, Москва*

²⁾ *Institut de Lumiere Extreme (ILE) ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, F-91761
Palaiseau Cedex, France*

³⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

Создана аппаратура, развита методика и получены экспериментальные результаты по дифракции Дебая-Шеррера в геометрии «обратного» рассеяния. Разработана программа обработки дифракционных колец, позволяющая подогнать модель под экспериментальные данные с воспроизводимостью лучше долей пикселя картины. Обсуждаются перспективы использования методики для целей материаловедения.

Беляев Анатолий Дмитриевич, к.ф.-м.н.
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1 , НИЦ "Курчатовский институт"
Тел: 8(499)1967538; Факс: 8(499)1967723; E-mail: anatoly_belyaev@mail.ru

ВСТАВКА ДЛЯ ПРИГОТОВЛЕНИЯ И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРИМЕСЬ-ГЕЛИЕВЫХ КОНДЕНСАТОВ

Р.Е. Болтнев¹, В.Д. Кирюхин², В.В. Хмеленко³

¹ *Филиал Института энергетических проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

² *Факультет физики и астрономии, Университет Нью-Джерси, США*

³ *Факультет физики и астрономии, Университет Техаса АИМ, Техас, США*

В докладе представлено описание вставки, разработанной и изготовленной в ФинЭПХФ РАН, для проведения исследований структуры примесь-гелиевых конденсатов (ПГК) в рентгеновском криостате на Источнике синхротронного излучения Брукхэвской Национальной Лаборатории (США).

Примесь-гелиевые конденсаты формируются в объёме сверхтекучего гелия при конденсации в нём струи газообразного гелия с примесью (~ 1 %) исследуемых веществ (D_2 , N_2 , O_2 , Ne, Ar либо Kr). Представлены наиболее важные результаты исследований, полученные на данной вставке. Было установлено, что образцы ПГК представляют собой пористые структуры, формирующиеся в сверхтекучем гелии в результате смерзания нанокластеров примесного вещества. Характерные размеры нанокластеров 3-10 нм, а концентрация примесного вещества в конденсированном гелии может составлять $\sim 10^{19}$ - 10^{21} см⁻³. Данные малоуглового рассеяния подтвердили наличие в образцах широкого распределения пор по размерам от 8 до 860 нм. Исследования структуры нанокластеров, образованных атомами инертных газов, позволили установить, что кластеры криптона, аргона и неона (в основном) имеют *hico*-структуру с осью симметрии 5-го порядка. Ширина распределения кластеров по размерам приблизительно совпадает с размерами кластеров. При этом, более крупные неоновые кластеры (состоящие из более чем 6000 атомов), имеют декаэдрическую структуру, также с осью симметрии 5-го порядка.

Методика открывает уникальную возможность исследования изменений структуры и размеров нанокластеров при разогревах образцов ПГК.

Болтнев Роман Евгеньевич

142432, Московская обл., Ногинский р-н, г. Черноголовка, пр. акад. Семёнова, д.1, корп.10
Тел.: (916)6801645; Факс: (816)6803573; E-mail: boltnev@biner.ac.ru

**РОЛЬ АТОМОВ ВОДОРОДА В НАНОЧАСТИЦАХ ПАЛЛАДИЯ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ
ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
ЗА K- И L- КРАЯМИ**

А. Л. Бугаев, А.В.Солдатов, Л. А. Бугаев

Физический факультет Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Актуальной задачей в исследовании наночастиц палладия является определение локальной атомной структуры в присутствии водорода. В наночастицах палладия вопрос о местоположении внедренных атомов водорода остается открытым, в отличие от массивных образцов металлического палладия, структура которых при внедрении водорода, достаточно подробно изучена в современной литературе.

Совместный анализ K- и L- спектров поглощения палладия в наночастицах размером 1,3-10 нм до и после насыщения водородом (спектры предоставлены проф. Ван Бокховеном, Институт технологии и биоинженерии, Цюрих) позволил предложить ряд теоретических моделей структуры наводороженных наночастиц. Вопреки устоявшемуся мнению о том, что в K-спектрах поглощения палладия присутствие водорода проявляется только в "сжатии" спектра в сторону меньших энергий за счет увеличения межатомных расстояний Pd-Pd, прямые расчеты показывают, что при появлении водорода наблюдается перераспределение интенсивностей первых краевых максимумов в теоретических спектрах, характер которого зависит от занимаемой водородом позиции. Такие изменения в K-спектрах не происходят при формальном увеличении межатомных расстояний в отсутствие водорода, что позволяет судить по ним не только об изменении межатомных расстояний, но и о позициях занимаемых водородом. Установлено, что сохранение отношения интенсивностей первых максимумов, наблюдаемое в эксперименте, может быть обусловлено занятием водородом различных неэквивалентных позиций, для каждой из которых наблюдается различный вклад в K- и L- спектры. Дана интерпретация существенным различиям в L-спектрах наночастиц палладия до и после насыщения водородом.

Бугаев Арам Лусегенович
344037, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5,
Тел.: (863)2975336; Факс: (863)2975120; E-mail: arambugaev@gmail.com

УСТАНОВКА ДЛЯ МЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЛИТОГРАФИИ НА ВЭПП-4

А.Н. Генцелев, Б.Г. Гольденберг, А.Д. Николенко,
В.Ф. Пиндюрин, И.В. Полетаев

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

Несмотря на развитие LIGA-технологии, традиционно позволяющей создавать глубокие микроструктуры с микронными и более поперечными размерами элементов, по-прежнему сохраняется актуальность и потребность в создании микроструктур с большим аспектным отношением и с субмикронными размерами (см. например [1]). Создание таких микроструктур может быть реализовано с помощью глубокой рентгеновской литографии в более мягком спектральном диапазоне (0.2÷1 нм) по сравнению с характерным используемым диапазоном традиционной LIGA-технологии (0.1÷0.2 нм).

В работе описана конструкция изготовленной и установленной на метрологической станции синхротронного излучения (СИ) [2] из накопителя ВЭПП-4 установки для проведения мягкой рентгеновской литографии. При планируемых на ближайшие годы энергиях электронов E_e работы накопителя ВЭПП-4 $E_e = 1.8 \div 4.5$ ГэВ критическая длина волны λ_c синхротронного излучения, приходящего на станцию, находится в диапазоне $\lambda_c = 1.85 \div 0.12$ нм, что хорошо подходит для мягкой рентгеновской литографии.

Рассматриваются различные аспекты создания глубоких микроструктур с субмикронными размерами на установке: рентгеновские шаблоны и их контраст, времена экспонирования, тепловые режимы рентгеношаблонов и способы минимизации их температурных деформаций.

1. G.N.Kulipanov, et al. Fabrication and preliminary testing of regular microporous membranes manufactured by deep X-ray lithography at the VEPP-3 storage ring // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. - 1995. - V.A359, N 1/2. - P.404-408.

2. Николенко А.Д. и др. Станция СИ ВЭПП-4 «Космос» для метрологических измерений в мягком рентгеновском и ВУФ диапазонах // VII национальная конференция РСНЭ – НБИК 2009: Тезисы докладов. – М.: ИК РАН – РНЦ КИ, 2009. – С. 601.

МЕТОД МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ СИЛИКАТНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

И.Б.Глебова, В.В.Голубков

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург

Многие Золь-гель системы на разных стадиях их формирования обладают свойствами, присущими фрактальным объектам. Для их исследования авторы [1] использовали метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР), который позволяет извлечь существенную информацию о случайных процессах. Для интерпретации кривых рассеяния была привлечена фрактальная геометрия. В зависимости от условий синтеза систем могут быть получены нанокomпозиты в виде однородных структур, а также структур с фрактальной массой или (и) поверхностью, что позволяет контролировать свойства материалов.

МУРР позволяет определять для каждого структурного уровня тип фрактала, его фрактальную размерность и размер фрактального агрегата.

Это можно проиллюстрировать на примере исследования силикофосфатных [2] и эпоксисиликатных ксерогелей [3]. Фрактальность наноструктур, формирующихся в гибридных органо-неорганических силикофосфатных ксерогелях, является многоуровневой, включающей массовые и поверхностные фракталы. Для эпоксисиликатных композитов наблюдается одноуровневая фрактальность.

1. Фракталы в физике. Труды VI международного симпозиума по фракталам в физике (МЦТФ, Триест, Италия, 9-12 июля, 1985)

2. Шилова О.А., Шилов В.В. Нанокomпозиционные оксидные и гибридные органо-неорганические материалы, получаемые золь-гель методом. Синтез. Свойства. Применение. // Наносистемы. Наноматериалы. Нанотехнологии. Сборник научных трудов под ред. акад. А.П. Шлака. Т. 1, № 1, Киев: Академперіодика, 2003, с. 9-83.

3. Шилова О. А., Хамова Т. В., Михальчук В. М., Мовчан Т. Г., Власов Д. Ю., Франк-Каменецкая О. В., Маругин А. М., Голубков В. В., Глебова И. Б. Нанокomпозиционные эпоксидно-силоксановые покрытия, модифицированные различными функциональными добавками. //Материалы IV Всероссийская конференция по наноматериалам «НАНО – 2011». М., 2011. С. 476.

Глебова Ирина Борисовна
199034, Санкт-Петербург, наб.Макарова, д.2
Тел.: (812)3252113; Факс: (812)3282241; E-mail:iraglebova@mail.ru

**ДВУХЭЛЕМЕНТНАЯ ФОКУСИРУЮЩАЯ СИСТЕМА РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА НА
БАЗЕ ИЗОГНУТОГО КРИСТАЛЛА И РЕФРАКЦИОННОЙ ЛИНЗЫ.**

О.Ю. Горобцов¹⁾, А.Д. Беляев¹⁾, А.Н. Артемьев¹⁾, Н.А. Артемьев²⁾,
Ю.И. Дудчик³⁾, А.А. Демкив¹⁾, А.Г. Маевский¹⁾, Б.Ф. Кириллов¹⁾,
С.И. Тютюнников⁴⁾, В.Н. Шаляпин⁴⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт, Москва*

²⁾ *Institut de Lumiere Extreme (ILE) ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, F-91761
Palaiseau Cedex, France*

³⁾ *Институт прикладных физических проблем, Курчатова 7, Минск, Беларусь*

⁴⁾ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

Приведены результаты измерений размеров и интенсивности освещенности пятна сформированного двухэлементной системой, состоящей из изогнутого брэгговского кристалла и составной рефракционной линзы. Экспериментально получен пятикратный выигрыш в освещенности пятна в фокусе по сравнению с использованием только рефракционной линзы и двукратное уменьшение размера фокусного пятна по сравнению с применением только изогнутого кристалла.

Горобцов Олег Юрьевич
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1 , НИЦ "Курчатовский институт"
Тел: 8(499)1967538; Факс: 8(499)1967723; E-mail: oleggoros@gmail.com

16-ПОЛЮСНАЯ РАДИОЧАСТОТНАЯ ЛОВУШКА ДЛЯ ЗАРЯЖЕННЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ

А.А.Гуда¹⁾, А.В.Солдатов¹⁾, S.Klump²⁾, W.Wurth²⁾

¹⁾ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

²⁾ University of Hamburg, Hamburg, Germany

Нанокластеры - частицы содержащие всего от 1 до 10000 атомов - исключительно важны благодаря важным приложениям в катализе, доставке лекарств, а также для фундаментальных исследований их необычных магнитных и электронных свойств. Для их изучения необходимо найти подходящий способ хранения. В настоящее время нанокластеры производятся и хранятся в растворах, на подложках и в электромагнитных ловушках [1].

В настоящей работе проведено проектирование радиочастотной ловушки и расчёт траекторий движения заряженных нанокластеров внутри неё. Среди различных используемых на настоящий момент конфигураций радиочастотных ловушек выбрана линейная 16 полюсная. Такое количество полюсов является удобным с точки зрения практического производства и достаточным для создания области хранения нанокластеров без существенного их возмущения переменным электрическим полем [2].

Длина ловушки составляет 180см. По длине ловушка разбита на 34 сегмента, что позволяет создавать градиент постоянного электрического поля внутри неё. К каждому сегменту подводятся 2 фазы переменного напряжения с частотой в диапазоне 1-15МГц и амплитудой 100-600В. В работе рассчитаны рабочие параметры ловушки для эффективного хранения нанокластеров с массой в диапазоне 10-10000 а.е. Использование ловушки предполагается на конечной станции синхротрона PETRA-III по схеме описанной в [3].

1. Wolfgang Paul, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 29 (1990) 739-748

2. Gerlich D. 1992 Adv. Chem. Phys. 82 1

3. K.Hirsch, J.T.Lau, и др. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42 (2009) 154029

Гуда Александр Александрович, аспирант

344090, Ростов-на-Дону, ул.Зорге, д.5

Тел.: (863)2975326; Факс: (863)2901003; E-mail: guda@sfned.ru

АНАЛИТИЧЕСКАЯ МИКРОСТРАТИГРАФИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.В.Дарьин¹⁾, И.А.Калугин¹⁾, Я.В.Ракшун²⁾

¹⁾ *Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск*

²⁾ *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск*

В последние десятилетия применение синхротронного излучения для аналитических исследований стало широко доступно. Это привело к созданию нового направления в рентгеноспектральном анализе – микроанализу (micro-XRF). На ВЭПП-3 (ИЯФ СО РАН) первые эксперименты по сканирующему микроанализу были проведены в период 1989 – 95 гг. и продолжены в 2000-х в серии работ по сканированию озерных донных отложений. Для реализации этого направления было создано специальное сканирующее устройство, обеспечивающее требуемые параметры эксперимента: одномерный сканер и система коллимации пучка позволяли проводить определение более 20 микроэлементов с пределами обнаружения ~ 1-5 ppm в кернах донных осадков с пространственным разрешением 50-100 мкм по одной координате при энергии возбуждения 10-40 кэВ. Используемая экспериментальная установка позволила получить новое качество палеоклиматических реконструкций – годовое (а в ряде случаев – сезонное) временное разрешение при длине временных рядов в несколько тысяч лет.

Станция сканирующего рентгенофлуоресцентного микроанализа, включает в себя следующие основные блоки: 1) Монохроматор; 2) Рентгеновская фокусирующая оптика; 3) Сканирующее устройство; 4) Детектор PentaFET (Oxford Instruments) и спектрометрический тракт. Управление станцией осуществляется при помощи ПЭВМ с использованием специального программного обеспечения.

Разработана методика анализа природных образцов (кернов донных осадков и денро-кернов), включающая отбор и подготовку образцов, микроанализ с пространственным разрешением 50 – 100 мкм, обработку РФА спектров.

Дарьин Андрей Викторович, с.н.с.
630090, Новосибирск, пр.ак.Коптюга, д.3
Тел.: (383)3333312; Факс: (383)3301861; E-mail: darin@ngs.ru

**РЕНТГЕНООПТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СТАНЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ С
ВЫСОКОЙ ЛОКАЛЬНОСТЬЮ НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИ. ПРОЕКТ.
ЧАСТЬ 2. ЗЕРКАЛА.**

А.А. Демкив¹⁾, А.Н. Артемьев¹⁾, Н.А. Артемьев²⁾, С.П. Беседин¹⁾,
О.Ю. Горобцов¹⁾, А.Д. Беляев¹⁾, А.Г. Маевский¹⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт, Москва*

²⁾ *Institut de Lumiere Extreme (ILE) ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, F-91761
Palaiseau Cedex, France*

Разработана рентгенооптическая схема станции для исследований с высокой локальностью на Курчатовском источнике СИ. Рентгенооптическая система может использоваться как в составе станции для исследования материалов в экстремальных условиях – высокие давления, высокие и низкие температуры, так и для освещения образцов, одновременно исследуемых атомно силовым микроскопом. В качестве вариантов фокусирующих элементов схемы рассмотрены зеркала полного внешнего отражения эллиптической формы.

Демкив Андрей Александрович

123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1, НИЦ «Курчатовский институт»

Тел: 8(499)1967538; Факс: 8(499)1967723; E-mail: andrey@alpha.ru

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА МОНОКРИСТАЛЛОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ, ВОСПРОИЗВОДИМЫХ В ПОВТОРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

А.П. Дудка

Институт кристаллографии РАН, Москва

Разработан системный подход к структурному анализу кристаллов, включая *нестехиометрические*, для получения воспроизводимых* результатов высокой относительной точности. Новый подход основан на сопоставлении измерений, полученных в разных экспериментальных условиях (метод межэкспериментальной минимизации). Созданный пакет программ **ASTRA** [1-4] включает 6 методов, предложенных впервые. В **ASTRA** с помощью межэкспериментального сравнения учитываются и уточняются различные аспекты процесса дифракции – характеристики дифрактометров и излучения; форма, размеры, доменное строение и элементный состав образцов; аномальное рассеяние; тепловое движение атомов; перераспределение валентного заряда при вступлении атомов в химическую связь; особенности дифракции нейтронов; особенности дифракции электронов с акцентом на оценку многоволновых эффектов и т.д. Подход проверен при исследовании структуры кристаллов нескольких семейств. Впервые в структурном анализе получены результаты, воспроизводимые в повторных экспериментах (в пределах 2.5-4.5 σ), при повышении почти в два раза их относительной точности ($R=0.5-0.8\%$ при уточнении ~ 90 параметров по ~ 4000 независимых рефлексов при покрытии 99.5% и разрешении $\sin\theta/\lambda|_{\max} \approx 1.35\text{\AA}^{-1}$, $d=0.37\text{\AA}$).

*Воспроизводимость – степень совпадения параметров модели с учетом их расчетных погрешностей при проведении повторных исследований одним и тем же методом, на идентичных объектах испытаний. Отчеты по проектам Международного союза кристаллографов и отдельные работы показывают, что воспроизводимость результатов обычных структурных исследований не выполняется.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 09-02-00444, а также грантом поддержки Ведущих научных школ (№ НШ-4034.2010.5).

1. Dudka A. (2007). *J. Appl. Cryst.* **40**, 602-608.
2. Dudka A. (2008). *J. Appl. Cryst.* **41**, 83-95.
3. Dudka A. (2010). *J. Appl. Cryst.* **40**, 27-32.
4. Dudka A. (2010). *J. Appl. Cryst.* **43**, 1440-1451.

Дудка Александр Петрович

119333, Москва, Ленинский пр., 59, Институт кристаллографии РАН

Тел.: 8(499)1350330; E-mail: dudka@ns.crys.ras.ru

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ, АМОРФНЫХ И
БИОМИНЕРАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ДИФРАКТОМЕТРЕ С ЛАУЭВСКОЙ
ФОКУСИРОВКОЙ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

А.А.Калоян, Е.С.Коваленко, К.М.Подурец

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

На Курчатовском источнике синхротронного излучения функционирует порошковый дифрактометр, в монохроматоре которого применена фокусировка пучка в горизонтальном направлении за счет дифракции в лауэвской геометрии на одном из кристаллов. В работе проведен *gaу-tracing* для данной схемы эксперимента и показаны отличия этой схемы от традиционных схем построения монохроматоров СИ. Приводятся примеры структурных исследований, выполненных с помощью дифрактометра. Так, исследованы металлические стекла системы Zr-Cu-Al, гидриды интерметаллидов Се-Ni, образцы мочекаменных конкрементов, и др.

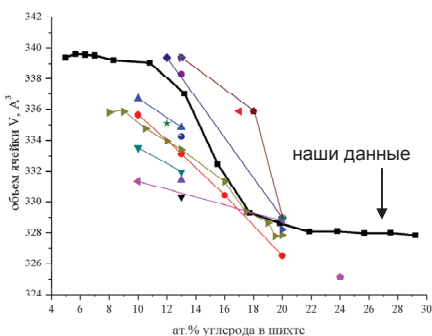
Калоян Александр Альбертович
123182 Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.
Тел.: 8(499)1967351; E-mail: alexander.kaloyan@gmail.com

ОСОБЕННОСТИ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ И УПОРЯДОЧЕНИЯ УГЛЕРОДА В КАРБИДЕ БОРА

И.Д.Ковалев, В.И.Пономарев, В.И.Вершинников, С.В.Коновалихин
Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН,
Черноголовка

Сопоставление литературных экспериментальных данных (РСА, нейтронотграфия) [1-4] карбида бора показало, что параметры ячейки карбида бора одинакового состава не совпадают (рисунок). С целью выяснения причин этого несоответствия методом СВС был синтезирован карбид бора с различным соотношением бор/углерод. Параметры ячейки определялись методом РСА.

Анализ полученных нами данных подтвердил существование разброса в параметрах ячейки при повторных синтезах, однако четкой корреляции с изменением температуры (от 1700 до 2500°C) не установлено. Такое подтверждение разброса параметров при постоянном составе указывает на то, что вероятной причиной разброса является степень упорядочения углерода в структуре. То есть в структуре переменного состава B_xC_y ($x+y=15$) наряду с разупорядочением возможны процессы упорядочения при замещении атомов бора атомами углерода как в линейных группах C–B–C, так и в икосаэдре B_{12} . Причем максимальный разброс параметров близок к составу $B_{13}C_2$, что подтверждается изменением полуширины пиков на рентгенограммах.



1. Gosset D., Colin M., J.Nucl.Mater., 1991, V.183, p.161.
2. Kwei G., Morosin B., J.Phys.Chem., 1996, V.100, №19, p.8031.
3. База данных PDF2.
4. Коновалихин С.В., Пономарев В.И., ЖНХ, 2009, т.54. с.1; ЖФХ, 2010, 84, с.1586.

Ковалев Иван Дмитриевич

142432, Черноголовка, Институтский пр., д.8

Тел.: 8(49652)46370; Факс:8(49652)46222; E-mail: i2212@yandex.ru

СИСТЕМА СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ И МЕР ДЛЯ МЕТРОЛОГИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ

С.А. Кононогов, Б.Н. Кодекс

ФГУП «ВНИИМС», г. Москва

Разработана и аттестована первая очередь системы стандартных образцов утвержденного типа (ГСО) и мер (тестовых образцов) для метрологического обеспечения дифрактометрических измерений структурных параметров на различных диапазонах строения веществ и материалов. Эта система направлена на повышение достоверности данных при установлении зависимостей состав-структура-дисперсность-свойств при разработке материалов для ответственных деталей различных инженерных сооружений, особенно при использовании нанофрагментированных материалов.

Для проблем поиска и разработки новых материалов были развиты различные математические методы, например методы факторного анализа и др., которые позволяли сократить число испытываемых в дальнейшем комбинаций и изменить уровни содержания компонент в предлагаемых сплавах, при сохранении безопасности и живучести технических систем, создаваемых на основе разработанных материалов. С другой стороны за последнее десятилетие произошла гармонизация с международными метрологическими организациями совокупности базовых понятий, которая повышает успешность таких экспериментов, обусловленную наличием набора возможных исходных гипотез и обозначением образующихся в результате такого эксперимента факторов.

В настоящее время на основе создания структурированных баз высокоточных данных стало возможным использовать следующий более высокий уровень технологий поиска, основанных на системно-информационном подходе. Системный анализ становится основой процесса многокритериальной оптимизации во время выбора состава материалов для узлов инженерных сооружений. Из-за того, что они работают при различной нагрузке и условиях окружающей среды, к ним предъявляются часто разнонаправленные требования. В этом случае системный подход с использованием экспертных систем обеспечивает построение гибкой системы управления и принятие необходимых решений в недостаточно четких требованиях к новым композициям. Новые подходы были использованы для оптимизации состава и термообработки ряда материалов с высокими прочностными и ресурсными свойствами, включая биметаллические клапаны для автомобильных двигателей нового поколения, новые адаптивные сплавы для подшипников, газозовов и др.

Кононогов Сергей Алексеевич, д.т.н.
119361, Москва, ул. Озерная, д. 46
Тел.: 8(499)7920705; E-mail: kononogov@vniims.ru.

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ СПЕКТРОСКОПИИ НА ТЕПЛОВЫХ И ЭПИТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНАХ НА НЕЙТРОННОМ КОМПЛЕКСЕ ИЯИ РАН

А.С.Кононыхин¹⁾, Е.С.Клементьев^{1,2,3)}, Р.А.Садыков¹⁾, В.Н.Матвиенко⁴⁾,
П.А.Алексеев^{5,3)}, Э.А.Коптелов¹⁾

¹⁾ *Институт ядерных исследований РАН, Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *НИЯУ МИФИ, Москва*

⁴⁾ *РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск*

⁵⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Рассмотрены перспективы развития нейтронной спектроскопии на нейтронном комплексе ИЯИ РАН, где запущен в эксплуатацию импульсный источник нейтронов “spallation” типа ИН-06. Представлены проекты двух новых экспериментальных установок неупругого рассеяния нейтронов на ИН-06: времяпролетного (TOF) спектрометра прямой геометрии «Гибрид» и TOF спектрометра обратной геометрии «Глобус». Поскольку ИН-06 имеет жесткий нейтронный спектр, новые спектрометры должны использовать тепловую и горячую части нейтронного спектра, а также эпитепловые нейтроны. Обсуждаются: области научного применения новых установок, выбор параметров, соответствующих оптимальным светосиле и энергетическому разрешению, технические детали спектрометров. Выбранные конструктивные схемы спектрометров основываются как на прямой, так и на обратной геометрии для метода времени пролета. Спектрометр прямой геометрии использует гибридную схему, сочетающую импульсный источник, кристалл-анализатор и временной анализатор. Спектрометр обратной геометрии с бериллиевым фильтром будет обладать рекордным эффективным телесным углом системы детектирования. Обсуждаются возможности проведения экспериментов в области нейтронной спектроскопии в экстремальных условиях – при высоком давлении и в сильных импульсных магнитных полях.

Алексей Сергеевич Кононыхин, вед. инженер
117198, Москва, проспект 60-летия октября, 7а, ИЯИ РАН
Тел.: 8(496)7510191; Факс: 8(496)7510711; E-mail: konon49@mail.ru

МОДЕРНИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО УПРАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОМ СТАНЦИИ ПРЕЦИЗИОННОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ

М.Г. Кузнецов¹⁾, В.Г. Карайченцев¹⁾, А.А. Мозгин¹⁾, В.Ф. Чистюнин¹⁾,
Э.Х.Мухамеджанов²⁾, М.М.Борисов²⁾, В.А.Шишков³⁾.

¹⁾ ООО Научно-производственный центр “СИСТАЛ”, ЗелАО, г. Москва, Россия.

²⁾ НБИК Центр НИЦ Курчатовский институт”, Москва, Россия.

³⁾ Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия.

Станция прецизионной рентгеновской оптики “ПРО” выполняет исследования кристаллических материалов рентгенодифракционными методами высокого разрешения: двух- и трехкристальная дифрактометрия, метод стоячих рентгеновских волн, многоволновая дифракция, поверхностная дифракция, фазовый анализ, рентгеновская рефлектометрия и др. Для улучшения управляемости станцией, была проведена глубокая модернизация устройств и программно-аппаратного комплекса системы автоматизированного управления (САУ). Было выполнено: Введено прямое управление 30 шаговыми приводами, каждый из которых имеет интеллектуальный PIC контроллер.

Механические ограничители движения по координатам заменены на оптоэлектронные датчики.

Улучшено управление пьезоприфодом.

Проведена замена программного обеспечения (ПО) САУ “СИСТАЛ – ПРО-М”. В ПО реализован новый интерфейс, который содержит дополнительные возможности в обработке данных, синхронизации с внешними устройствами, сохранению параметров системы и текущих координат на диск в режиме реального времени.

Устройства регистрации БДС (сцинтилляционные датчики) переведены на управление от PIC процессоров.

РЕНТГЕНОВСКИЙ ШЕСТИЛИНЗОВЫЙ НАНОИНТЕРФЕРОМЕТР

С.М.Кузнецов¹⁾, В.А.Юнкин¹⁾, М.В.Григорьев¹⁾, В.Г.Кон²⁾, И.И.Снигирева³⁾,
А.А.Снигирев³⁾

- 1) Учреждение Российской академии наук Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка*
- 2) Национальный исследоват. центр «Курчатовский Институт», Москва*
- 3) Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция*

Развитие технологий изготовления кремниевых планарных рентгеновских параболических нанофокусирующих преломляющих линз позволило создать двухлинзовый наноинтерферометр, который способен генерировать синусоидальную стоячую рентгеновскую волну с переменным периодом от десятков нанометров до десятков микрометров [1].

В данной работе исследуется более сложный тип интерферометра, который состоит из шести плотно упакованных линз поперек пучка. Такой интерферометр может создавать более сложную структуру стоячей волны, которая на определенных расстояниях имеет узкие резонансные максимумы с 6-ти кратным усилением интенсивности по сравнению со средней величиной.

В работе рассмотрены проблемы проектирования и изготовления интерферометра, представлена разработанная компьютерная программа для численного моделирования его оптических свойств и приведены результаты тестирования первых образцов на источнике синхротронного излучения 3-го поколения в Гренобле.

Шестилинзовый интерферометр является простейшим примером прибора, представляющего собой периодическую решетку источников. На нем приближенно наблюдаются такие явления как эффект Тальбо и когерентные резонансы. Предложенный интерферометр позволяет тестировать когерентность излучения современных синхротронов и рентгеновских лазеров. Он может быть использован в новых высоко разрешающих методах диагностики наноструктур и наноматериалов.

Работа поддержана грантами РФФИ 10-02-01021-а и 09-07-00359-а

1. A. Snigirev et al., Phys. Rev. Lett., 2009, **103**, 064801, p.1-4.

ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОЙ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ РЕФРАКЦИОННОЙ ЛИНЗОЙ

А.К.Лорсабян, М.К.Бальян, А.Г.Григорян

“Научно-исследовательский центр с использованием синхротронного излучения (CANDLE)” НИИ при Ереванском Государственном Университете, Ереван, Армения

В последнее время в литературе обсуждается вопрос сочетания рентгеновских зонных пластинок и рефрактивных линз с одним симметричным или с одним асимметричным отражением, а также их сочетание с двойным асимметричным отражением [1]. При дважды асимметричной дифракции фокальное расстояние зонной пластинки и рефракционной линзы умножается на квадрат асимметричности b^2 и при $b \ll 1$ фокальное расстояние линзы становится порядка метра и меньше, причем такая система эквивалентна матрице линз с числом линз $N = 1/b^2$. В [1] исследован случай, когда размер линзы в плоскости дифракции можно считать бесконечной. В данной работе учитываются конечные размеры линзы. Получены выражения для интенсивности и размера фокуса для падающей плоской волны. В случае линзы с бесконечными размерами распределение интенсивности и размер фокуса для плоской волны в плоскости фокусировки дается функцией влияния точечного источника. При учете конечных размеров линзы это распределение переходит в распределение вида $(2R_0b)^2(\sin x/x)^2$, где $x = k\xi R_0b/F$, k - волновое число, ξ - координата поперек дважды дифрагированного пучка, R_0 - половина геометрической апертуры линзы, F - фокальное расстояние системы. Размер фокуса определяется как $\pi F/kR_0b$. На рис.1 приведены кривые интенсивности в дважды дифрагированном пучке в фокальной плоскости - отражение Si220 MoK α , линза из Ве с кривизной в апексе $R = 1$ мм, $b = 0.05$.

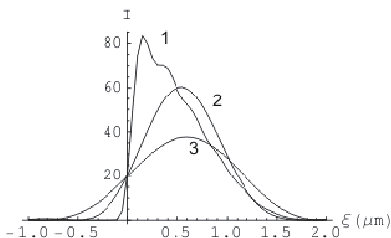


Рис.1 Распределение интенсивности в фокальной плоскости для $R_0 = 6.0, 1.0, 0.6$ мм (кривые 1,2,3 соответственно). Численный расчет.

1. А.Н.Grigoryan, М.К.Balyan&А.Н.Toneyan, J.Synch.Rad., **17**, 332, 2010.

Агаси Лорсабян, м.н.с.

0040, Ереван, Армения, ул.Ачарян, д.31

Тел.: (37410)612558; Факс: (37410)629806; E-mail: lorsabyan@gmail.com

**РЕНТГЕНООПТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СТАНЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ С
ВЫСОКОЙ ЛОКАЛЬНОСТЬЮ НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИ. ПРОЕКТ.**

ЧАСТЬ 1. ЛИНЗЫ.

А.Г. Маевский¹⁾, А.Н. Артемьев¹⁾, Н.А. Артемьев²⁾, С.П. Беседин¹⁾,
О.Ю. Горобцов¹⁾, А.Д. Беляев¹⁾, А.А. Демкив¹⁾

¹⁾ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт, Москва*

²⁾ *Institut de Lumiere Extreme (ILE) ENSTA ParisTech, Ecole Polytechnique, F-91761
Palaiseau Cedex, France*

Рассмотрены варианты рентгенооптической схемы станции для исследований с высокой локальностью на Курчатовском источнике СИ. Рентгенооптическая система может использоваться как в составе станции изучения материалов в экстремальных условиях – высокие давления, высокие и низкие температуры, так и для облучения образцов, исследуемых атомно силовым микроскопом. В качестве вариантов фокусирующих элементов схемы рассмотрены рефракционные одномерные и двумерные, а так же поликапиллярные линзы.

Маевский Андрей Геннадьевич
123182, Москва, пл. академика Курчатова, д.1 , НИЦ “Курчатовский институт”
Тел: 8(499)1967538; Факс: 8(499)1967723; e-mail: phd_@mail.ru

УСТАНОВКА ДЛЯ РЕНТГЕНО-ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА В УСЛОВИЯХ ПВО НА СТАНЦИИ РФА-СИ НАКОПИТЕЛЯ ВЭПП-3

В.В. Максимовская, К.В. Золотарёв, В.А. Чернов, Н.А. Мезенцев, Я.В. Ракшун

Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Метод рентгенофлуоресцентного анализа в условиях полного внешнего отражения в течение последних 10 лет стал мощным аналитическим методом для элементного анализа микроскопических количеств вещества с чувствительностью порядка нескольких ррв. Эта техника особенно привлекательна для экспресс-анализа жидких проб в экологии, медицине и токсикологии. В данной работе описывается приставка для РФА-ПВО анализа, и приводятся первые результаты, полученные на станции РФА-СИ накопителя ВЭПП-3 СЦСТИ.

Максимовская Виктория Владимировна, ведущий инженер
630090, Новосибирск, пр. академика Лаврентьева, д.11
Тел.: (383)3294119; Факс: (383)3307163; E-mail: v.v.maksimovskaya@inp.nsk.su

ПРОЕКТ ДИФРАКТОМЕТРА НА ЭПИТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНАХ НА НЕЙТРОННОМ ИСТОЧНИКЕ ИН-06 В ИЯИ РАН

В.Н.Матвиенко¹⁾, Е.С.Клементьев^{1,2,3)}, Р.А.Садыков²⁾, Э.А.Коптелов²⁾

¹⁾ *РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск*

²⁾ *Институт ядерных исследований РАН, Москва*

²⁾ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³⁾ *НИЯУ МИФИ, Москва*

Представлен дизайн-проект новой установки «Градус» на импульсном источнике нейтронов на основе испарительно-скалывающей реакции ИН-06 в ИЯИ РАН, предназначенной для структурных исследований сильно поглощающих нейтроны материалов при помощи рассеяния эпитепловых и горячих нейтронов. Обсуждаются область научного применения новой установки, выбор параметров, соответствующих оптимальным светосиле и разрешению по межплоскостному расстоянию, технические детали дифрактометра «Глобус». Выбранная конструктивная схема установки основана на методе по времени пролета нейтронов и рассеянии хорошо коллимированного (~10 угловых минут) пучка на малые углы. Рассчитаны зависимости функции разрешения дифрактометра от межплоскостного расстояния, угла рассеяния, длительности нейтронного импульса и геометрических параметров установки.

Условия на образце предусматривают широкий интервал температур, приложение высокого давления (вплоть до нескольких десятков кбар для образцов объемом в единицы куб. см), использование импульсных магнитов с магнитным полем до 30Тл.

Владимир Николаевич Матвиенко, нач. группы
456770, Снежинск, Челябинская область, ул. Васильева, д. 13
Тел.: (351-46)52285; Факс: (351-46)52233; E-mail: mvn@mail.vega-int.ru

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕНТГЕНОВСКОГО АНАЛИЗА НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

Н.А.Медетов, Д.А.Карташов, Д.И.Смирнов, Р.С.Орлов

*Московский государственный институт электронной техники, Москва,
Зеленоград*

В докладе рассматривается применение современных информационных технологий для анализа рентгеновских рефлектограмм. Многоволновая относительная рентгеновская рефлектометрия является одним из новых неразрушающих методов исследования тонкопленочных многослойных наноструктур. Для интерпретации экспериментальных данных необходимо решать обратную задачу, что представляет основную трудность в применении этого метода.

Применение оптимизированных алгоритмов поиска локального экстремума функции и реализация параллельных вычислений на графических процессорах, базирующаяся на технологии CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), позволяет рассчитывать параметры тонкопленочных слоев в многослойной структуре со значительным сокращением времени компьютерных вычислений. Результаты сравнения расчетного времени обработки одних и тех же экспериментальных данных на центральном процессоре и на графических процессорах показывают, что использование последних более чем в 10 раз позволяет уменьшить время обсчета рефлектограмм [1].

Для определения параметров многослойной структуры также предлагается использовать модель Лапласа, в которой учет влияния шероховатостей межслойных границ реализован за счет введения дополнительных промежуточных слоев с нулевой шероховатостью, имеющих заданный закон изменения оптической плотности. Варьирование количества таких слоев позволяет контролировать точность решения обратной задачи.

1. Карташов Д.А., Медетов Н.А., Смирнов Д.И. и др. // Электронный журнал «Труды МАИ». – М., 2010. – Вып. 40.
– URL: <http://www.mai.ru/science/trudy/>

Медетов Нурлан Амирович, к. ф.-м. н.
124498, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д.5, НИЛ РМТА
Тел.: (499)7343011; Факс: (499)7343011; E-mail: rmta@miee.ru

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЙНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКИМИ МЕМБРАНАМИ

А.П.Петраков¹⁾, Е.Ф.Кривошапкина²⁾, Я.В.Зубавичус³⁾

¹⁾ *Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар*

²⁾ *Институт Химии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар*

³⁾ *РНЦ «Курчатовский Институт» Москва*

Мембраны широко применяются для очистки и разделения жидких и газообразных веществ в медицине, биологии, пищевой промышленности и других областях. Повысить качество мембран позволит использование новых неорганических материалов: SiO_2 , TiO_2 , ZrO_2 и Al_2O_3 . Процесс получения пленок достаточно сложный, проходит в несколько стадий, а конечный продукт зависит от ряда факторов. Существенную помощь в разработке технологии мембран с заданными свойствами может оказать метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей.

Цель работы состоит в исследовании, методом малоуглового рассеяния синхротронного излучения, изменения структуры керамических пленок в процессе их перехода в мембраны. В представленной работе пористые мембраны получали на основе Al_2O_3 . В качестве связующего вещества использовали водорастворимый полимер - поливиниловый спирт (ПВС). Исследования структуры проведены на синхротронном источнике станции малоуглового рассеяния СТМ «Центра синхротронных исследований и нанотехнологий» РНЦ «Курчатовский институт».

Использовалась коллимационная система по Кратки, на излучении $\lambda = 1.537$ Å. Измерения проводились в интервале изменения модуля вектора рассеяния позволяющем изучать объекты с линейными размерами от 2 до 26600 нм. Проведенные исследования свидетельствуют о влиянии термической обработки на размер рассеивающих частиц. Выводы сделаны на основе анализа рассеяния в областях: Гинье, фрактальной и Порода. Точка начала области Порода указывают на наличие частиц размером 5 нм, которые уменьшаются с повышением температуры обжига. Рассеяние в области Гинье свидетельствует о наличии частиц размером 6.4 нм. Анализ рассеяния в фрактальной области свидетельствует о наличии кластеров в форме «розочек».

Работа выполнена в рамках программы «Развитие научного потенциала высшей школы на 2009-2011 годы», проект № 2.1.1/5848.

Петраков Анатолий Павлович, профессор
167001, Сыктывкар, Октябрьский пр-кт, д.55
Тел.: (8212)436203; Факс: (8212)436820; E-mail: petrakov@syktsu.ru

АППАРАТУРНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ

Я.В. Ракшун, В.А. Чернов, Н.М. Мезенцев, Г.Н. Кулипанов, М.А. Холопов,
Д.С. Сороколетов

Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Метод XAFS-спектроскопии хорошо развит для жесткого рентгеновского диапазона и используется для исследования локальной структуры вокруг тяжелых элементов, однако, современные тенденции в нанотехнологии и наноиндустрии основаны на использовании широко распространенных в природе легких элементов. XAFS-исследования в мягком рентгеновском диапазоне отличаются от традиционных методов в силу ряда причин, среди которых: использование дорогостоящего сверхвысоковакуумного оборудования, принципиально иного подхода к организации экспериментальной работы, необходимости “чистого” переноса образца из исследовательской лаборатории до экспериментальной станции.

В настоящей работе описывается аппаратно-методический комплекс, создаваемый в СЦСТИ, для исследований методом XAFS-спектроскопии в мягком рентгеновском диапазоне. Комплекс состоит из двухкристального монохроматора с фиксированным положением пучка, системы зеркал скользящего падения для подавления высших порядков монохроматического пучка и его фокусировки. Сверхвысоковакуумный экспериментальный модуль служит для загрузки и очистки образца, его характеристики и съемки XAFS-спектров. Монохроматор, оборудованный 4-мя парами кристаллов, позволяет проводить исследования образцов в диапазоне от 1 до 6 кэВ без вскрытия монохроматора. Таким образом, данный комплекс позволяет получать EXAFS спектры элементов начиная с Na до Cr, и снимать L и M края переходных и редкоземельных элементов.

Работа поддержана грантом МК-2589.2011.2.

Ракшун Яков Валерьевич, с.н.с.

630090, Новосибирск, пр. академика Лаврентьева, д.11

Тел.: (383)3294413; Факс: (383)3307163; E-mail: rakshun@mail.ru

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ

И.С. Савельев¹⁾, С.К. Савельев²⁾

¹⁾ ООО «Прецизионные технологии», Санкт-Петербург

²⁾ БГТУ, Санкт-Петербург

Развитие рентгеновских оптических систем предъявляет все более высокие требования к качеству как системы в целом, так и к качеству отдельных компонентов, составляющих систему.

Одной из распространенных технологий производства отражательной оптики на основе многослойных интерференционных структур является процесс репликации подложек таких оптических элементов с поверхности мастер - шаблона.

Изготовление мастер - шаблона для описанной технологии является достаточно сложной задачей в ходе которой требуется эффективная процедура определения качества поверхности обрабатываемой детали.

В данной работе рассматриваются технологические особенности реализация изготовления подобной оптики, расчет траекторий инструмента, процедуры определения формы и шероховатости поверхности (в основном цилиндрических поверхностей) измерением на однокоординатной измерительной машине.

В работе решалась задача подавления отдельных сильных шумовых выбросов, которые часто возникают на реальных поверхностях в результате их повреждения в процессе изготовления и в силу особенностей используемой технологии обработки сильно затрудняют последующую обработку поверхности.

Представлены результаты реализации технологического комплекса для производства деталей с площадью порядка 20000 мм² и ошибкой формы лучше 100 нм.

Представленные способы производства и измерения поверхности на основе разработанного специализированного программного обеспечения и стандартного типового оборудования, позволяют построить эффективный процесс высокоточного изготовления поверхности на основе относительно дешевых и простых в эксплуатации технологических комплексов, что открывает возможности развертывания соответствующих производств силами малых предприятий.

Савельев Иван Сергеевич
196066, Санкт-Петербург, ул. Алтайская, 12, 34,
Тел.: 8(921)9717415; Факс: 8(812)3733370; ivan@x-energo.com

АППАРАТУРА ДЛЯ МЕССБАУЭРОВСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ МАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУР

В.Г.Семенов¹⁾, В.В.Панчук¹⁾, С.М.Иркаев²⁾

¹⁾ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербурга

²⁾ Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербурга

Магнитные свойства наноструктур проявляют большое разнообразие и значительно отличаются от массивного материала. Основной вклад в этом случае вносят размерные эффекты, влияние поверхности, образующих наноструктуру кластеров, межкластерные взаимодействия или взаимодействия кластеров с матрицей и межкластерная организация. К числу наиболее характерных и впечатляющих свойств нанокластеров следует отнести, прежде всего, суперпарамагнетизм, который проявляется при размерах магнитных кластеров 1-10 нм, магнитную однодоменность [1]. Среди методов исследования магнитных свойств наночастиц, одним из наиболее информативных является мессбауэровская спектроскопия. В отличие от магнитных измерений, мессбауэровская спектроскопия может выявить магнитную динамику наночастиц в частотном диапазоне $10^7 - 10^{10} \text{ с}^{-1}$, характерных для мессбауэровского «окна» [2].

Рассматривается разработанный авторами комплекс аппаратуры, предназначенный для реализации методики комбинационного рассеяния мессбауэровского излучения. Для преодоления проблемы счетности при регистрации рассеянного излучения (а, следовательно и длительности эксперимента), характерной для геометрии рассеяния, вместо фильтра-анализатора для гамма-оптической схемы эксперимента разработали специализированный резонансный детектор. Для контроля за процессом селективного возбуждения необходимого ядерного подуровня сверхтонкой структуры был использован лазерный интерферометр, обеспечивающий точность задания скорости доплеровского модулятора не хуже $\pm 2 \text{ мкм}$.

1. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: Ком.Книга, 2006

2. Чуев М.А. Письма в ЖЭТФ, 2006, т.83, вып.12, с.668

Семенов Валентин Георгиевич, профессор
198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул.Лесная, д.36
Тел.: (812)4284039; Факс: (428)4286939; E-mail: val_sem@mail.ru

ФОТОНЕЙТРОННЫЙ ИСТОЧНИК НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ СЛ75

В.М.Скоркин, С.В.Акулиничев

Институт ядерных исследований РАН, Москва

Представлен макет исследовательского импульсного фотонейтронного источника (ИФНИ) на основе линейного ускорителя электронов СЛ75, предназначенного для исследования материалов радиационными методами с помощью нейтронного излучения. На установке ИФНИ возможно проведение нейтронного активационного анализа изотопного состава материалов, определение радиобиологической эффективности вторичного излучения от захвата тепловых нейтронов в биологических образцах, калибровка различных детекторов в потоках тепловых, медленных и быстрых нейтронов. Источником нейтронов служит тяжеловодная мишень D_2O , размером $30 \times 30 \times 30$ см³, окруженная графитовым отражателем и свинцовым поглотителем. Линейный ускоритель электронов с энергией 6 МэВ генерирует импульсное излучение фотонов, длительностью 4 мкс и частотой 50-300 Гц и средней энергией ~ 2 МэВ, которое создаёт в воде мощность поглощенной дозы около 5 Гр/мин.

В результате фотоядерной реакции в мишени D_2O образуются быстрые нейтроны, которые замедляются и создают потоки медленных и тепловых нейтронов.

При испытании установки ИНФИ потоки тепловых и быстрых нейтронов были измерены с помощью детекторов нейтронного излучения БДН-02 системы радиационного контроля Центра лучевой терапии. Источник обеспечивает плотность потока тепловых, медленных и быстрых нейтронов ~ 10^5 н·см⁻²·с⁻¹ в объеме около 30 л.

Скоркин Владимир Михайлович
117312, Москва, В-312, проспект 60-летия октября, д.7а
Тел.: 8(496)7510180; Факс: 8(496)7510171; E-mail: skorkin@inr.ru

**NEW SMALL ANGLE NEUTRON SCATTERING INSTRUMENT IN AUSTRALIA:
FEATURES OF DESIGN, STATUS OF THE PROJECT, EXPECTED PERFORMANCE
AND EXPECTATIONS IN TOP-END SCIENCE**

A.B. Соколова ^{1), 2)}

¹⁾ *Bragg Institute, Australian Nuclear Science and Technology Organisation*

²⁾ *Institute of Crystallography RAS, Moscow, 119333, Russia*

Small Angle Scattering (SAS) technique is a powerful unique tool to study various materials. The method provides structural information on condensed phases of different nature at resolution level ranging from about one to hundreds of nanometers.

Number of large facilities provides access to SAS X-rays (SAXS) and neutron (SANS) instruments. Australian Nuclear Science and technology Organization (ANSTO, Sydney, Australia) successfully operates one SANS instrument Quokka and recently commenced construction of the second SANS instrument, Bilby [1]. The Bilby will operate in Time-of-Flight (ToF) mode using four equal choppers. Use of ToF technique at reactor source will give opportunity to adjust wave length resolution $\Delta\lambda/\lambda$ in the range from 4% to 30%. Utilization of wide wave length spectrum ($2\text{\AA}\pm 20\text{\AA}$) allows sufficiently increase dynamic Q-range of collected data comparing with that available on instruments operating with monochromatic beam. Additionally to ToF mode, the instrument will be operable in slit mode, which will allow to record data at very low Q (up to $7\cdot 10^{-5}\text{\AA}^{-1}$).

To enhance quality of the instrument special detection system will be used. The Bilby will be equipped with two detectors, back one consisting of one panel 64cm x64cm and front one, so called curtain detector. The front detector consists of four panels, movable in the beam. Area of each curtain is 32cmx64cm.

The presentation is focused on description of design features of the new SANS instrument. Possibilities to use SANS technique in applied science, in particular in biotechnology and medicine, in metal and in magnetic devices industry are also described. The capabilities of two instruments at ANSTO, Quokka and Bilby as well as a way to get access for use of the instruments for industrial applications are underlined.

[1] http://www.ansto.gov.au/research/bragg_institute/facilities/instruments/bilby_-_2nd_small-angle_neutron_scattering_instrument

Anna Sokolova, instrument scientist / project manager
Bragg Institute, ANSTO, New Illawarra Rd, Lucas Heights, 2234 New South Wales, Australia
Tel.: (+61)2 9717 7288; Fax: (+61)2 9717 3606; E-mail: anna.sokolova@ansto.gov.au

МОДЕРНИЗАЦИЯ СТАНЦИИ РФА-СИ ДЛЯ РАЗВИТИЯ МЕТОДА СКАНИРУЮЩЕГО МИКРОАНАЛИЗА

Д.С.Сороколетов, Я.В. Ракшун, А.В. Дарьин, В.В. Максимовская, М.А. Холопов
Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

В последние десятилетия применение синхротронного излучения (СИ) для аналитических исследований стало широко доступно. Это привело к созданию нового направления в рентгеноспектральном анализе – микроанализу (micro-XRF). В частности, развитие метода сканирующего рентгенофлуоресцентного микроанализа позволило проводить исследование протяжённых слоистых структур (например, донных осадков) с высоким пространственным разрешением для получения развёрнутой геохимической информации.

Для ряда задач требуемое пространственное разрешение составляет порядка 10 мкм и чувствительность порядка 0,1 – 1 ppm. Мировой опыт развития показывает возможность реализации подобных аналитических систем с использованием современных источников СИ и рентгенооптических схем фокусировки возбуждающего и флуоресцентного излучений.

Целью данной работы была модернизация станции РФА-СИ накопителя ВЭПП-3, для развития метода сканирующего микроанализа. На станции были установлены блоки входных и выходных высоковакуумных танталовых щелей, заменён монохроматор и установлено сканирующее устройство с блоком фокусировки падающего излучения. Кроме того, выполнена работа по автоматизации модернизированной станции.

Монохроматор типа Channel cut Si(111) обеспечивает получение монохроматического излучения в диапазоне энергий 10 – 48 кэВ. В настоящее время для фокусировки падающего излучения используется поликапиллярная линза с устройством микроподстройки. Фактор увеличения яркости составляет ~ 10 при размере фокусного пятна ~ 150 мкм на энергии возбуждения 20 кэВ. Сканирующее устройство позволяет осуществлять протяжку длинных (до 30 см) образцов через пучок СИ с минимальным шагом 10 мкм.

Работа поддержана интеграционным проектом СО РАН № 92 и грантом МК-2589.2011.2.

Сороколетов Дмитрий Сергеевич
630090 г. Новосибирск, ул. пр-т ак. Лаврентьева, д. 11
E-mail: sorokoletovds@ngs.ru

**СОРЕБЦИОННЫЙ РЕФРИЖЕРАТОР С ОТКАЧКОЙ ГЕЛИЯ-3 ОХЛАЖДАЕМЫЙ
КРИОРЕФРИЖЕРАТОРОМ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА**

А.Н. Черников, В.Н. Трофимов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Разработан сорбционный рефрижератор с откачкой гелия-3 охлаждаемый криорефрижератором на импульсных трубках SUMITOMO SRP-052A. Рефрижератор имеет две ступени откачки. Первая ступень предназначена для конденсации и откачки гелия-4, холодопроизводительность которой используется для конденсации гелия-3. Вторая ступень предназначена для откачки гелия-3. Конечная температура, достигаемая рефрижератором 0.33К. Время удержания этой температуры не менее 24 часов. Оперативное время, требуемое на переконденсацию гелия и получения низкой температуры составляет 1 час. Криостат является автономным прибором, так как не содержит внешних газовых коммуникаций ответственных за получение сверхнизких температур, рабочий газ хранится непосредственно в насосах при давлении до 50 атм.

Черников Александр Николаевич
Почтовый адрес: 141980 Дубна, ул. Жолио-Кюри 6
Тел.: (49621)62769; Факс.; E-mail: chern@nf.jinr.ru

ДАТЧИК ПОЛОЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА ОСНОВЕ ЗЕРКАЛ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ

В.А. Чернов, А.В. Косов, Я.В. Ракшун, Н.А. Мезенцев

Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Современные рентгенооптические схемы каналов синхротронного излучения включают в себя большое количество рентгенооптических элементов отклоняющих и фокусирующих пучок СИ. Потребительское качество выходного пучка в сильной степени зависит от его пространственной стабильности в процессе эксперимента, в частности, сканирования по энергии. В настоящее время развиты и широко используются несколько типов датчиков профиля и положения пучка, однако они хорошо подходят только для жесткого рентгеновского диапазона. Из-за сильного поглощения в мягкой рентгеновской области использование этих датчиков сильно затруднено. С другой стороны, неотъемлемой особенностью конструкции каналов мягкого рентгеновского диапазона является использование коллимирующих и фокусирующих зеркал скользящего падения. В данной работе предлагается измерение проекции профиля рентгеновского пучка путем регистрации профиля вторичных электронов выбитых с поверхности зеркала. Приводятся экспериментальные результаты по измерению положения рентгеновского пучка и пространственной чувствительности детектора на основе зеркал скользящего падения. Рассматриваются физические факторы определяющие чувствительность детектора.

Работа поддержана грантом МК-2589.2011.2.

Чернов Владимир Александрович, ведущий инженер
630090, Новосибирск, пр. академика Лаврентьева, д.11
Тел.: (383)3294413; Факс: (383)3307163; E-mail: v.a.chernov@mail.ru

НАНОФОКУСИРУЮЩАЯ ПРЕЛОМЛЯЮЩАЯ ОПТИКА ДЛЯ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.А.Юнкин¹⁾, С.М.Кузнецов¹⁾, М.В.Григорьев¹⁾, В.Г.Кон²⁾, Г.Воган³⁾, И.И.Снигирева³⁾,
А.А.Снигирев³⁾

¹⁾ Учреждение Российской академии наук Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка

²⁾ Национальный исследоват. центр «Курчатовский институт», Москва

³⁾ Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

Методы диагностики, развиваемые на базе жесткого рентгеновского излучения (10-100 кэВ), обладают огромным потенциалом в исследовании наноструктур и наноматериалов. Однако эффективная нанофокусировка рентгеновского излучения традиционными методами, основанными на полном отражении (зеркала) или дифракции (зонные пластинки), существенно затруднена. Нами предложена и реализована оригинальная концепция преломляющей рентгеновской оптики – планарные нанофокусирующие параболические линзы и интегральные линзовые системы, изготовленные с помощью современных кремниевых технологий микроэлектроники и микросистем.

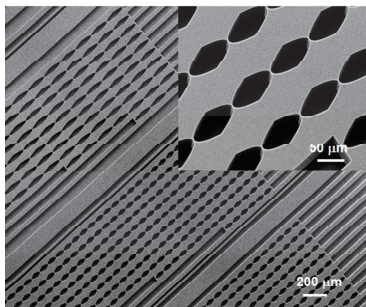


Рис. 1. Кремниевые планарные параболические нанофокусирующие линзы и интегральные линзовые системы. Глубина профиля 100 мкм

Проект по созданию кремниевой нанофокусирующей преломляющей оптики был реализован в тесном сотрудничестве между ИПТМ РАН, НИЦ «Курчатовский институт» и Европейским центром СИ (ESRF). Разработанные нами топологические решения и технологические схемы позволили изготовить параболические линзы с глубокими преломляющими профилями с шероховатостью менее 20 нм, микронными межлинзовыми перемычками и физической апертурой от 30 до 100 мкм. С помощью таких линз была продемонстрирована рекордная фокусировка 90 нм на энергии рентгеновского излучения 35 кэВ. Рентгеновский нанозонд на основе планарных линз был испытан и применен на станциях ESRF: ID6 и ID11.

Работа поддержана грантами РФФИ 10-02-01021-а и 09-07-00359-а

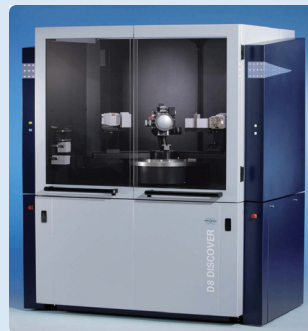
Юнкин Вячеслав Анатольевич, к.ф.-м.н.
142432, Черноголовка, Институтская ул., д.6, ИПТМ РАН
Тел.: (49652)44257; Факс: (495)9628047; E-mail: yunkin@iptm.ru

СОВРЕМЕННЫЕ РЕНТГЕНОВСКИЕ ДИФРАКТОМЕТРЫ



Дифрактометр высокого разрешения D8 DISCOVER

- Фазовый и структурный анализ твердых тел (порошки, поли- и монокристаллы)
- Исследование морфологии межслойных границ в многослойных структурах, с толщинами слоев вплоть до нескольких монослоев
- Изучение особенностей морфологии поверхности и приповерхностных слоев по глубине (от десятых долей нанометра)
- Изучение структурных превращений в твердых растворах



www.bruker.ru
www.bruker-axs.de



ООО Брукер

119991, Москва,
Ленинский проспект 47,
Тел: +7 495 9358081
Тел: +7 495 5029006
xray@bruker.ru

Представительство группы компаний BRUKER

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ:	ТЕЛ. (812) 923-0155
ЕКАТЕРИНБУРГ:	ТЕЛ. (343) 345-8592
КАЗАНЬ:	ТЕЛ. (843) 264-4687
НОВОСИБИРСК:	ТЕЛ. (983) 121-6389

ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЦЕНТРОВ

info@intertech-corp.ru

8-800-200-4225 (звонок бесплатный по РФ)

АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТИ (РФЭС, УФЭС, ОЭС)



ESCALAB 250Xi

- Многофункциональный современный спектрометр для комплексного исследования поверхности методами электронной спектроскопии (РФЭС, УФЭС, ОЭС, ОЭМ) и визуализации в параллельном режиме
- Непревзойденные характеристики разрешения и чувствительности
- Спектроскопия ионного рассеяния (ISS) и спектроскопия потерь энергии отраженных электронов (REELS) в базовой конфигурации спектрометра



THETA PROBE

- Уникальная двухкоординатная система детектирования для реализации методики PARXPS (РФЭС с параллельной регистрацией угловой зависимости фотоэмиссии) без необходимости наклона образца
- Неразрушающий анализ толщины и состава ультратонких покрытий (< 10 нм) с разрешением до одного монослоя



K-Alpha

- Полностью интегрированный и автоматизированный фотоэлектронный спектрометр, максимально компактен и прост в обращении
- Идеальное решение для проведения рутинного анализа поверхности: спектроскопии, картирования, распылительного профилирования



Компоненты для систем анализа поверхности

- Широкий выбор различных типов компонентов и аксессуаров для всех систем (источники излучения, анализаторы, манипуляторы и др.)
- Подбор решений для любых исследовательских задач

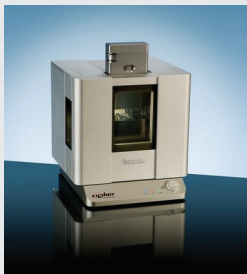
www.intertech-corp.ru

ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЦЕНТРОВ

info@intertech-corp.ru

8-800-200-4225 (звонок бесплатный по РФ)

АТОМНО-СИЛОВЫЕ МИКРОСКОПЫ



CYPHER™

- Последняя разработка ведущего производителя атомно-силовых микроскопов (АСМ) Asylum Research Inc.
- Не имеющая аналогов система сканирования, самый низкий уровень шумов сканера
- Самая высокая скорость сканирования
- Система автоматической настройки лазера и фотодиода SpotOn™, новые запатентованные методики
- Идеальное решение для фундаментальных задач
- Уникальные режимы Band Excitation, DART, Dual AC



MFP-3D STAND ALONE™

- Инструмент для научно-исследовательских работ в нанометровом диапазоне измерений
- Высокая чувствительность, стабильность, прецизионность, предельно низкий уровень шумов конструкции
- Самый широкий набор опций и аксессуаров для АСМ и СЗМ

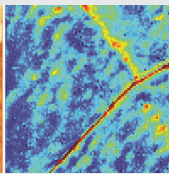
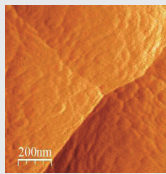
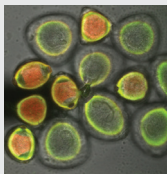
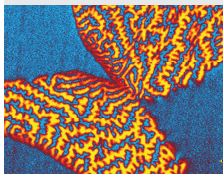


MFP-3D-Bio™

- Высокоэффективный АСМ для исследования биологических объектов. Совместим со всеми инвертированными микроскопами
- Универсальная система, сочетающая молекулярное разрешение и измерение сил порядка 1 пН с инвертированным оптическим микроскопом
- Комбинация с FRET, PFRAP, TIRF и с лазерными конфокальными системами

Зонды, аксессуары

- Выбор зондов к АСМ и СЗМ от ведущих мировых производителей (NANOWORLD, Nanosensors, Olympus, Asylum Research)
- Широкий набор аксессуаров для различных приложений



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

A..Z

Abbey B	385	Messerschmidt M.	385
Acremann Y.	385	Mancini D.C.	385
Aksenov V.V.	416	Mancuso A.P.	385
Appavou M-S.	345	Moeller S.	385
Aristov V.V.	324	Majid M.J.	203
Asokan K.	261	Medvedyev S.	253
Attwood D.	385	Mertig M.	67
Bang E.	385	Mestres L.	381
Blüher A.	67	Mirebeau I.	247
Bondarenko S.	498	Mjasischev D.	436
Bottyan L.	416	Molodtsov S.L.	15
Bouwman W.	364	Nagy B.	416
Boysen H.	437, 515	Nugent K.A	385
Burghammer M.	58	Neeb M.	170
Christen J.	197	Nikitenko W.F.	416
Cadenazzi G.	385	Noltemeyer M.	197
Eremets M.	253	Okada K.	100
Feng Y.	385	Peele A.G.	385
Fernandez-Perea M.	385	Palasyuk T.	253
Groves M.	34	Paulmann C.	515
Graves C.	385	Raitman E.	436
Gruebel G.	498	Rosenthal M.	58
Gupta A.	100	Rosta L.	73
Hau-Riege S.	385	Sakdinawat A.	385
Heimann P.	385	Scherz A.	385
Haramus V.	434	Sinn H.	385
Hempel T.	197	Soufli R.	385
Hoser A.	436	Schreiber J.	83
Ioffe A.I.	345	Schreiber N.	83
Ishida K.	392	Seidel O.-S.	436
Joshi V.	385	Singer A.	385
Je J.H.	429	Sharma G.	100
Jirak Z.	342	Shulakov E.V.	324
Krupin O.	385	Schlotter W.F.	385
Krzywinski J.	385	Sprung M.	498
Kamali S.	100	Stanh J.	436
Klaus Pranzas P.	248	Turner J.J.	385
Klumpp S.	535	Tecchio L.	245
Kokubun J.	392	Tkacz M.	321
Kuyumchyan D.A	324	Torok Gy.	160
Kuyumchyan A.V.	324	Török Gy.	30, 70
Lamzin V.	34	Turcu R.	73
Liu Y.	385	Vartanyants I.	385
Lin C-R	350	Vekas L.	73
Lott D.	154, 219	Wu B.	385
Lüning J.	385	Weckert E.	385
		Wurth W.	385
		Wang T.	385
		Williams G.J.	385

Yefanov O.M. 385
 Yoda Y. 100
 Zhu D. 385
 Zhernenkov K.N. 416

А..Я

Аббасзаде Р.Г. 99
 Абгарян К.К. 131
 Абдрафикова И.М. 525
 Абдулвахидов Б.К. 354
 Абдулвахидов К.Г. 262, 354
 Абдулнасыров Э.Г. 28
 Абдулов М.М. 277
 Авакян Л.А. 412, 423, 493
 Авдеев А.В. 93
 Авдеев М.В. 9, 73, 83, 84, 465
 Авдюхина В.М. 239, 340
 Агапов Б.Л. 25, 111
 Агафонов С.С. 288
 Адамчук В.К. 126
 Акимова О.В. 239, 340
 Акопова О.Б. 133
 Акопян А.В. 56
 Акопян Н.А. 137
 Акпаров В.Х. 63
 Аксенов В.Л. 9, 73, 83, 84, 93,
 190, 465
 Аксенов С.М. 278
 Аксенов С.Н. 345, 526, 527
 Акулиничев С.В. 554
 Акчурин М.Ш. 424
 Алакбарова Э.Э. 179
 Алалыкин А.С. 491
 Алалыкин С.С. 491
 Алекперов Э.Ш. 132
 Александров А.И. 133, 142
 Алексеев П.А. 325
 Алексеев А.А. 345, 526, 527
 Алексеев А.С. 107
 Алексеев В.И. 172, 187
 Алексеев П.А. 240, 247, 343, 542
 Алексеева О.А. 267, 279, 349
 Алексеева О.М. 45
 Алексеева Т.А. 134, 146, 212, 216

Алешина Л.А. 280, 303, 346, 459
 Алиева А. М. 99
 Алов Н.В. 199
 Алпатова А.В. 135, 232
 Альперович И.Г. 281
 Алюшин М.В. 370
 Амарантов С.В. 425
 Амирханов И.В. 478, 479, 487
 Амрастанов А.Н. 426
 Андреев А.В. 233
 Андреева М.А. 100
 Андриевский Р.А. 241
 Андрушевский Н.М. 427
 Анисимов Д.В. 136
 Анохин К.В. 371, 510
 Антипин А.М. 279
 Антипов Е.В. 253
 Антонов Е.А. 209, 428
 Антонов А.Н. 282
 Анчаров А.И. 249
 Аргунова Т.С. 429
 Арискин Н.И. 502
 Аристов В.В. 386
 Артемов В.В. 54, 68, 218
 Артемьев А.Н. 529, 528, 534,
 537, 546
 Артемьев Н.А. 528, 529, 534,
 537, 546
 Артюхов В.Г. 88
 Арутюнян В.В. 137, 191, 202
 Арчаков А.И. 95
 Асадов Ю.Г. 312
 Асадчиков В.Е. 121, 185, 233, 371,
 450
 Асланов Л.А. 23
 Астафьев С.Б. 430
 Атоян В.А. 137
 Аульченко В.М. 65, 502, 517, 520
 Афанасьев В.П. 144, 169
 Афанасьев М.С. 497
 Афонина Е.В. 138
 Ахадов Т.А. 370
 Ахметова Е.Р. 139
 Бажанов Д.И. 186, 131, 417, 409
 Байдакова М.В. 148
 Баканов В.М. 140
 Бакиров А.В. 41, 127
 Баклагина Ю.Г. 38
 Балабаев Н.К. 401

Балаев В.В.	46	Борисов М.М.	190, 543
Балазюк В.Н.	509	Борисова П.А.	288
Балин В.А.	141	Бородина Т.Н.	68
Баловсяк С.В.	145, 415	Боронин А.И.	375
Балян М.К.	545	Борча М.Д.	145
Баранчиков А.Е.	248, 283, 296	Борщ Н.А.	334
Баратова Л.А.	92	Босак А.А.	242
Барахтенко Д.В.	133, 142	Бржезинская М.М.	175,272
Бардышев И.И.	143	Бронштейн Л.М.	90
Бармин Ю.В.	432	Брунков П.Н.	148
Барсуков А.К.	89	Брусницына Л.А.	146, 212
Басова Т.В.	375	Бугаев А.Л.	40, 66, 412, 493, 531
Батаев В.А.	382	Бугаев Л.А.	397, 406, 412, 423, 493, 531
Батаронов И.Л.	432	Бузанов О.А.	252, 264, 277, 320
Батраков А.А.	144, 169	Бузмаков А.В.	233,371, 433, 510
Башкин И.О.	284	Букреева Т.В.	68, 218, 222
Безсуднова Е.Ю.	80	Булавин Л.А.	73, 83, 84, 205, 465
Бекасова О.Д.	24	Булкин А.А.	462
Бекнозарова З.Ф.	285, 310	Булкин А.П.	183, 505, 526
Белашев Б.З.	286	Бульенков Н.А.	27, 101
Беленова А.С.	88	Бургхаммер М.	58
Беленькая И.В.	287	Бурлаков И.А.	286
Белов А.Ю.	387	Бурлакова Е.Б.	45, 61
Белов А.Г.	431	Бурлов А.С.	291, 357
Белов А.С.	516	Бусурин С.М.	289
Белов Д.	364	Бусурина М.Л.	289
Белогорохов А.И.	151	Буташин А.В.	460
Белушкин А.В.	205	Бушуев В.А.	389
Беляев А.Д.	528, 529, 534, 537, 546	Быков В.А.	494
Беляев Р.В.	373	Быкова В.В.	402
Беляков В.А.	388	Быкова Е.С.	224
Белякова О.А.	47, 360	Бюли Р.	325
Берлев А.И.	503, 504, 516, 527	Вазина А.А.	10, 48, 64, 65, 380, 502
Беседин С.П.	149, 537, 546	Вайнштейн Д.Л.	120
Билски П.	314	Валеев Р.Г.	147
Бинюков В.И.	45	Валеева Д.Н.	359
Бирманс А.	415	Вальковский Г.А.	148
Благов А.Е.	457, 492, 331	Вальтер Х.	370
Благовещенский Ю.В.	461	Ванецев А.С.	210, 434
Блинов И.А.	510	Ванцян М.А.	149
Бойко М.Е.	269	Варламова Е.Ю.	400
Болотина Н.Б.	278, 309, 349	Вартањанц И.	385
Болотов В.С.	168	Василевский И.С.	201
Болтнев Р.Е.	530	Василик Я.В.	466
Бондарев А.В.	432	Васильев А.Л.	141, 360
Бондарь А.М.	117	Васильев В.Д.	10
Бончик О.	415	Васильева А.А.	48, 64
Борисов В.О.	234		

Васильевский И.С.	119	Гайто О.М.	210, 434
Васильков А.Ю.	47	Галиев Г.Б.	201, 119
Ведринский Р.В.	405	Галимов Р.М.	153, 353
Вейко В.П.	76	Галин М.З.	394
Велиджанин А.А.	47, 360, 365, 406	Галкина А.Н.	77
Велихов В.Е.	369	Гамаюнова К.В.	406
Величковский Б.М.	370	Гамов Н.А.	159
Веремейчик Т.Ф.	290, 338	Гарабажив Я.Д.	145
Верин И.А.	251, 267, 279, 295, 349	Гарамус В.М.	205
Вершинников В.И.	540	Гармай Ю.П.	31, 420
Вилков О.Ю.	102	Гендлер Т.С.	282
Виноградов Е.А.	150	Генцелев А.Н.	532
Виноградова Л.В.	30	Герасименко Н.Н.	511
Винокуров З.С.	521	Герасько О.А.	270
Витченко М.А.	354	Герашенко О.В.	219
Владимирова Т.П.	449	Герчиков М.	191, 202
Власенко В.Г.	291, 298, 322, 336, 352, 357, 365, 423	Гильмутдинов Ф.З.	171
Власов В.П.	185	Гинзбург Б.М.	85
Вовкотруб Э.Г.	196	Гинзгеймер С.А.	426
Воган Г.	559	Глазков В.П.	288, 345
Вознесенский С.С.	77	Глазунов Е.А.	488
Волков В.В.	28, 34, 36, 79, 92, 121, 161, 390, 400, 484	Глатзел П.	411
Волков Ю.О.	121, 185	Глебова И.Б.	533
Волочаев М.Н.	292	Гниненко С.Н.	516
Волчков С.Е.	91	Гогин А.А.	103, 166, 437, 515
Волыхов А.А.	151, 235	Годунов А.С.	372
Вонсицки Я.В.	314, 328	Голентус И.Э.	438
Воробьев А.А.	156	Голованов Д.Г.	462, 495
Воробьева Н.Н.	34	Головина Т.Г.	451
Воронин В.И.	162, 220	Голощапов А.Н.	45, 61
Воронин Н.А.	413, 435	Голощапов Д.Л.	25
Воронина Е.В.	49	Голубев Н.А.	516
Воронкова В.И.	279, 349	Голубицкий А.О.	510
Воронов В.В.	393	Голубков В.В.	533
Выворотка И.	415	Гольденберг Б.Г.	532
Вялых Д.В.	67, 102, 122	Гомоюнова М.В.	102
Габдулхаков А.Г.	29, 46, 81	Горбачева М.В.	51
Габрельян Б.В.	456	Горбунова О.А.	189
Гавалян В.Б.	191, 202	Горловой А.В.	507
Гаврилов В.Н.	408, 436	Горобцов О.Ю.	528, 529, 534, 537, 546
Гаврилюк А.Г.	12, 243	Горшенев В.Н.	52
Гаджиев Э.Ш.	152	Горьков В.П.	427
Гадзаов А.Ф.	86	Горьковец В.Я.	286
Гаевский А.Ю.	438	Горячева К.А.	74
Гайнутдинов Р.В.	50, 135, 424	Готлиб И.Ю.	464
		Грабис Я.П.	158
		Граф К.	82
		Графутин В.И.	200

Гребенев В.В.	251, 293	Деянов Р.З.	441, 446
Гребенюк Г.С.	102	Джабаров С.Г.	244
Грибанов А.В.	247, 325	Джелони Дж.	433
Грибов И.В.	195	Джепаров Ф.С.	391
Григорьев М.В.	544, 559	Джилкибаев Р.М.	516
Григорьев С.В.	154, 156, 219, 221, 248, 296, 300, 339, 363, 364	Дидык А.Ю.	478, 487
Григорьева Н.А.	156, 364	Диков Ю.П.	113
Григорьева Т.Ф.	246	Димитрова О.В.	271
Григорян А.Г.	545	Дмитриев А.В.	104
Гришина О.В.	273, 294, 333	Дмитриева В.П.	261
Грищенко Ю.В.	53, 57, 94, 108, 163	Дмитриева Т.В.	350, 358
Груздев М.С.	142	Дмитриенко В.Е.	392, 418, 448, 463, 468, 469
Грушко Ю.С.	70	Довганюк В.В.	449
Грюнерт В.	138	Долбинина В.В.	251, 293
Губайдуллин А.Т.	525	Долганов В.К.	105
Губаль Н.А.	295	Долганов П.В.	105
Губанова Н.Н.	296	Домантовский А.Г.	116
Гуглев К.А.	246, 255	Домашевская Э.П.	25, 111, 114
Гуда А.А.	211, 260, 261, 535	Дороватовский П.В.	51, 519
Гудков А.Л.	103, 166	Дорофеев С.Г.	299
Гулютин А.В.	345	Дорошева А.А.	55
Гуляев Р.В.	375	Дубинина Е.А.	106
Гумаров Г.Г.	49	Дубинская Ю.Л.	350, 358
Гурин В.С.	205	Дубровинский Л.С.	314
Гурович Б.А.	116	Дуда Т.А.	217
Гурская Н.Г.	74	Дудка А.П.	538
Гурьянов А.М.	297	Дудчик Ю.И.	534
Гутерман В.Е.	406	Душе М.	281
Гутман Г.	513	Дышеков А.А.	442
Давидок А.	415	Дьякова Ю.А.	107, 222
Давыдов В.Ю.	230	Дьячкова И.Г.	207
Дадинова Л.А.	34	Дядькин В.А.	300, 339
Данг Н.Т.	316	Дядькина Е.А.	156, 219
Данилевич В.Н.	50, 54	Евдищенко Е.А.	451
Даниленко Т.Н.	298, 352	Евдокимов Ю.М.	79
Данилов С.В.	439	Евдоков О.В.	517
Даничев В.В.	95	Евстигнеева Т.Л.	301
Дарьин А.В.	536, 556	Евсюков С.Е.	195
Девяткина Е.Т.	249	Евсюкова М.А.	302
Дегтярева В.Ф.	440	Егоров А.В.	198
Дедюхин А.А.	155	Егоров В.А.	122
Деев А.Н.	147	Егоров В.К.	496, 497
Дембо К.А.	34, 36, 79, 92, 121, 161, 400	Егоров В.Н.	252, 264, 277, 320
Демкив А.А.	528, 529, 534, 537, 546	Егоров Е.В.	184, 496, 497
Дерменев А.В.	516	Екимова Т.А.	303
		Елисеев А.А.	151, 363, 364
		Елсуков Е.П.	49
		Ельников Л.В.	443

Елютин Н.О.	403, 480	Зинн Х.	433
Емельченко Г.А.	332	Зозуля А.В.	498
Ерицян Г.Н.	191, 202	Золотарев К.В.	499, 547
Ерко А.	299, 347	Золотых А.Н.	299
Ермаков А.Н.	157	Зоркин С.Н.	56
Ермаков Р.П.	393	Зотов С.Д.	115
Ерофеев Е.В.	110	Зубавичус Я.В.	47, 93, 151, 255, 291, 311, 357, 360, 365, 406, 423, 550
Ершов А.В.	114	Зюбин А.С.	235
Ершов Н.В.	304	Зюбина Т.С.	235
Ершов Н.З.	246	Жогин И.Л.	501
Ершов Ю.А.	52	Ибаева Р. З.	99
Есипов Р.С.	37	Ибрагимов Г. Б.	99
Ефимов В.Б.	305	Иванов В.К.	221, 248, 283, 296, 339
Ефимов В.В.	343	Иванов Д.А.	58
Ефимова О.И.	259, 371, 510	Иванов М.Г.	521
Ефимченко В.С.	321	Иванов С.В.	159
Жданова Е.В.	159	Иванов Ю.Д.	95
Желиговская Е.А.	27, 101	Иванова И.Н.	160
Жижин М.Н.	372	Иванова Н.А.	307
Жмуриков Е.И.	245	Иванова О.С.	248
Жогин И.Л.	517	Иванов-Шиц А.К.	394, 464
Жукова П.Н.	172, 189	Иванчев С.С.	62
Жуковская И.А.	413, 435	Ивашевская С.Н.	83, 308
Жуланов В.В.	517, 520	Ивлюшкин Д.В.	507
Журавлев К.С.	217	Изотов А.Н.	305
Жухлистов А.П.	306	Илатовский А.В.	31, 445
Жухлистова Н.Е.	46, 81	Ильиных И.А.	356
Забелин А.В.	48, 64, 65, 502	Илясов В.В.	246
Заварин Е.Е.	230	Имамов Р.М.	11, 119, 201
Загуменный М.Н.	95	Иминова И.М.	310
Задиранов Ю.М.	148	Иркаев С.М.	553
Заиченко А.С.	231	Иррибарра Э.	172, 187
Зайковский В.И.	270	Исаева В.И.	138
Зайцев В.Б.	125	Исаев-Иванов В.В.	31, 420, 445
Закалюкин Р.М.	56, 424, 464	Исмаилов Д.И.	132, 179, 330
Закирова Р.М.	171	Ищенко А.А.	441
Замараева Н.В.	157	Кабалов Ю.К.	301
Занавескин М.Л.	53, 94, 108, 163, 214	Кавеев А.К.	446
Занавескина И.С.	492	Каверин Б.С.	122
Заплитный Р.	415	Кагадей В.А.	110
Запорина Н.А.	158	Каганер В.М.	395
Зарипов М.Р.	444	Казак А.В.	161
Зарубин И.В.	109	Казанцева В.В.	224, 292
Затекин В.В.	199	Казбанов В.В.	59
Захаров А.В.	303	Казимиров А.И.	110
Зверев М.М.	159	Казимиров А.Ю.	398
Зверькова И.И.	258		
Зейфман Ю.С.	53, 57		
Зиборов В.С.	95		

Калинин Б.Д.	476	Клавсюк А.Л.	409
Калинин С.И.	505	Кладыко В.П.	449, 466
Калинин Ю.Е.	219	Классен Н.В.	35, 112
Калинкин А.В.	414	Клевалина Л.В.	163
Калян А.А.	379, 472, 508, 539	Клементьев Е.С.	247, 325, 343, 526, 542, 548
Калугин А.И.	447	Клечковская В.В.	11, 27, 38, 107, 163, 214
Калугин И.А.	536	Климов Е.А.	119, 201
Кальченко В.И.	32	Клюева М.В.	315
Калюканов А.И.	309	Клюшин А.Ю.	272
Камакин Н.Ф.	33, 60	Князев Г.А.	529
Каменев А.И.	441	Князев Е.В.	168
Каневский В.М.	185, 460	Кобзиев В.Ф.	147
Карайченцев В.Г.	543	Кобыльская Ю.В.	34
Каримов Д.Н.	295, 351	Ковалев А.В.	500
Каримов З.	285, 310	Ковалев А.И.	120
Карнаухов И.М.	457	Ковалев И.Д.	540
Карнаушенко Д.Д.	249	Ковалев Ю.Д.	289
Карпинский Д.	259	Ковалева Т.А.	88
Карташов Д.А.	549	Коваленко Е.А.	270
Касимова М.А.	42	Коваленко Е.С.	379, 472, 508, 539
Катышева А.С.	162	Коваленко О.В.	164, 177, 313
Кац Е.И.	105	Коваль Н.Н.	153
Кашкаров В.М.	25, 111	Коваль Н.Н.	353
Кашурникова О.В.	311	Ковальчук М.В.	14, 19, 94, 107, 108, 128, 222, 457, 492
Каюкова Г.П.	525	Ковивчак В.С.	168
Квардаков В.В.	128	Ковнир К.А.	333
Кварталов В.Б.	460	Кодесс Б.Н.	165, 167, 541
Квашнина К.О.	411	Кодесс П.Б.	165, 167, 541
Квеглис Л.И.	224	Кожевников И.В.	121, 450
Квеглис Л.И.	292	Кожевникова О.В.	89
Кедало К.А.	448	Кожин Т.Н.	488
Кедров В.В.	112, 228	Кожитов Л.В.	254
Керимов Р.Н.	312	Козаков А.Т.	246, 255
Керимова Э.М.	312	Козинкин А.В.	322
Кизима А.А.	84	Козинкин Ю.А.	397
Киле Е.О.	396	Козинкина Е.А.	423
Кирей Т.А.	84	Козленко Д.П.	205, 244, 314, 316, 328, 329, 342, 344
Кириленко Е.П.	103, 166	Козлитин А.И.	103, 166
Кириллов Б.Ф.	528, 529, 534	Козлов А.И.	103, 166
Кирилов В.А.	122	Козлов В.С.	70
Кириченко В.Г.	164, 177, 313	Козловская Н.А.	315
Кирпичникова Л.Ф.	387	Козловский В.Ф.	347
Кирсанов М.М.	516	Коковин Д.С.	372
Кирюхин В.Д.	530	Колесник С.Г.	70
Киселев М.А.	26	Колесников В.И.	211
Киселева Т.Ю.	71		
Кисловский Е.Н.	449, 458		
Кичанов С.Е.	205, 244, 314, 316, 328, 329, 342, 344		

Колесников Е.А.	282	Костишин В.Г.	254
Колесников И.С.	372	Котенев В.А.	143
Колесов В.В.	52, 373	Котин П.А.	299
Колосов А.Ю.	317	Котляр В.В.	452
Колпачева Н.А.	423	Кочелаб Е.В.	449
Колыбаева М.И.	319	Коюда Д.А.	114
Комаров П.В.	317, 348	Кравцова А.Н.	170, 341
Коммель И.Л.	167	Крайзман В.Л.	405
Кон В.Г.	398, 429, 470, 508, 544, 559	Красников Н.В.	516
Конарев Д.В.	268	Кременцова А.А.	45
Кондриков Н.Б.	231	Крестинин А.В.	272
Кондратьев В.И.	501	Кривандин А.В.	45, 61
Конников С.Г.	148, 269	Кривенцов В.В.	147
Коновалихин С.В.	540	Кривошапкина Е.Ф.	550
Коновко А.А.	94	Криш М.	242
Кононов М.А.	117	Крохин Н.В.	95
Кононова С.В.	160	Круминя А.Я.	158
Кононогов С.А.	541	Крупянский Ю.Ф.	28
Кононыхин А.С.	542	Крутько Н.П.	265
Коноплев Е.Е.	519	Кручинина И.Ю.	221
Константинова А.Ф.	451	Крылов П.Н.	155, 171, 491
Коныгин Г.Н.	49	Крылов С.А.	264
Копица Г.П.	221, 248, 283, 296, 434	Крысина О.В.	153
Коптелов Э.А.	505, 527, 542, 548	Крючкова Н.А.	32, 113, 375
Корепанов А.А.	168	Кубанкин А.С.	172, 187
Корженевский Д.А.	51	Кугаенко О.М.	252, 264, 277, 320
Коржецкий Ю.В.	350, 358	Кудашев С.В.	173
Коригодский А.Р.	149	Кудренко В.В.	332
Корнеев А.Е.	516	Кудренко Е.А.	112, 250
Корнеев В.Н.	48, 64, 65, 502	Кудрявцев Е.М.	115
Коробейникова Е.Н.	475	Кузнецов А.А.	519
Коровин А.М.	215	Кузнецов В.Л.	195, 503, 504
Коровушкин В.В.	315	Кузнецов М.Г.	543
Королев Ю.М.	254	Кузнецов С.М.	544, 559
Королик О.В.	194	Кузнецова Е.В.	503, 504
Кортаев Е.В.	32, 113	Кузнецова Л.В.	158
Коротков Н.Ю.	318, 253	Кузнецова М.В.	453
Корусенко П.М.	168	Кузовников М.А.	321
Корчевский В.В.	396	Кузьменко Т.А.	291
Корчуганов В.Н.	519	Кузьмин В.И.	86
Коршунов А.Б.	264, 277	Кукоренко В.В.	70
Коршунова Е.В.	291, 357	Кулагин Б.Б.	456
Косинова А.В.	319	Куликаускас В.С.	199
Косов А.В.	501, 558	Куликова О.В.	322
Косова Н.В.	249	Кулипанов Г.Н.	65, 499, 551
Костановский И.А.	144, 169	Култышева Ю.А.	454
Костин Г.А.	32	Кульбицкая Л.В.	265
		Кульвелис Ю.В.	62, 160
		Кульков С.Н.	323

Кулькова С.Е.	186	Литвинчук Т.В.	449
Кунду С.Ч.	64, 65	Лихачёв И.А.	128
Купенко И.И.	424	Лихачев И.В.	401
Куприянова Т.А.	64	Лихущина Е.В.	354
Куранова И.П.	37,63	Логинов Д.В.	459
Курганов Б.И.	24	Логинова С.В.	327
Курилова С.А.	34	Лойко Н.Г.	28
Курочкина Л.П.	425	Ломаева С.Ф.	182
Кустов Л.М.	138	Ломаченко К.А.	170
Кутузов Л.В.	116	Ломов А.А.	141
Куценко С.М.	474	Лорсабян А.К.	545
Кучин А.Г.	273	Лошак Н.В.	328
Куюмчян А.В.	324	Лубенченко А.В.	144
Куюмчян Д.А.	324	Лукашева Н.В.	38
Кютт Р.Н.	230, 399	Лукин Е.В.	244, 314, 329, 328, 342
Кязумов М.Г.	455	Лукин К.Г.	413, 435
Лаврентьев А.А.	456	Лукшина В.А.	304
Лаврухина С.А.	113	Лукьянов И.Ю.	402
Лазарев В.В.	135	Лукьянов К.А.	74
Лазуков В.Н.	240, 247, 325, 343	Лунин В.В.	198
Ланина Н.Ф.	10, 48, 64, 65, 502	Луцев Л.В.	156
Ланцов А.Д.	77	Львов Д.В.	391, 403
Лаптев М.А.	117	Любимов В.Ю.	474, 477
Лалук В.А.	400	Любомирский М.А.	178
Лате К.	244, 314, 328	Любутин И.С.	12, 253, 267, 318, 350, 358
Лашков А.А.	29, 46, 81	Лях В.В.	507
Ле Х.Т.	174, 187	Ляхов Н.З.	246
Лебедев А.А.	115	Машковцев М.Р.	507
Лебедев А.И.	299, 347	Мададзада А.И.	179
Лебедев А.М.	175, 441	Маевский А.Г.	528, 529, 534, 537, 546
Лебедев В.М.	326, 297	Маевский Е.И.	65
Лебедев В.Т.	30, 62, 70, 160, 297, 326	Мазалов Л.Н.	32, 113, 260, 375, 414
Лебедев Д.В.	31, 420	Мазалова В.Л.	55, 66, 211, 362
Лев Л.Л.	176, 188, 445	Мазаник А.В.	194
Левин И.С.	239, 340	Мазо А.М.	56
Левина В.В.	282, 356	Мазо Г.Н.	394
Левшин Н.Л.	123, 125	Майборода И.О.	53, 57
Легкодымов А.А.	64, 507	Макарова А.А.	67
Лемметюйнен Х.	107	Макарова И.П.	251
Лень Е.Г.	449, 458	Максимовская В.В.	547, 556
Леньшин А.С.	25, 111	Макух В.К.	249
Леонов В.Н.	177	Малеев С.В.	339
Летягин В.П.	65	Мамаев Ю.А.	394
Лидер А.М.	353	Мамедов А.И.	244
Лизунов В.В.	457, 466	Мамедова А.Ч.	132, 330
Лизунова С.В.	449, 457, 458, 466		
Липкин А.В.	51		
Литвин В.С.	345, 505, 526, 527		

Мамичев Д.А.	94	Михеев А.В.	113
Манукян А.М.	180	Михеева М.Н.	176, 188, 302
Манукян А.С.	423	Мозгин А.А.	543
Манцевич В.Н.	181	Мозгрин Д.В.	149
Маратканова А.Н.	182	Мокрушин А.Д.	143, 184
Мардасова И.В.	354	Молоденский Д.С.	519
Марков А.В.	249	Молодкин В.Б.	14, 438, 449, 458, 457, 466
Марков В.Ф.	109, 140, 157, 162, 196, 220	Молодкин В.В.	458
Мартусевич А.К.	33, 60	Молодцов С.Л.	67, 122
Мартынов В.И.	74	Монахов И.С.	192, 355
Марченко И.В.	68	Морилова В.М.	195
Марченков А.Н.	53, 94, 108, 163, 214	Морозов Ю.Г.	69, 289
Марченков Н.В.	331	Морченко А.Т.	254
Масалов В.М.	332	Москвин Д.О.	404
Маскаева Л.Н.	106, 109, 140, 157, 162, 196, 220	Москвин Е.В.	300, 339, 462
Маслова Н.С.	181	Москвина Н.А.	195
Матвеев В.А.	183, 516	Мудровская Н.В.	256
Матвиенко В.Н.	542, 548	Мулявко Г.Т.	448, 463, 468
Махаева Е.Е.	39	Мурзин В.Ю.	360
Махоткин И.А.	128	Мурин И.В.	464
Мачулин В.Ф.	466	Муслимов А.Э.	185, 460
Машин А.И.	114	Мустафаева С.Н.	312
Медведев Д.П.	372	Мутигуллин И.В.	131, 186
Медетов Н.А.	511, 549	Мухамедгалиева А.Ф.	117
Медиченко С.В.	265	Мухамеджанов Э.Х.	190, 468, 543
Межов-Деглин Л.П.	305	Мухамедзянов Х.Н.	140
Мезенцев Н.А.	499, 517, 547, 558	Мухгалин В.В.	147
Мезенцев Н.М.	551	Мясищев Д.Э.	408
Мельник Н.И.	509	Мясникова Н.А.	211
Мензель Д.	339	Мясниченко В. С.	335
Менушенков А.П.	273, 294, 302, 311, 325, 333	Набатов Б.В.	141, 451
Менушенков В.П.	294	Нагорный А.В.	465
Менцел Д.	300	Нажмудинов Р.М.	172, 187
Меньшиков К.А.	175	Назарова Т.И.	34
Меньшикова Г.Я.	373	Назарова Т.Н.	227
Миль Е.М.	45	Назин В.Г.	176, 188
Миньо Ж-М.	240, 325	Наими В.Г.	252
Миргород Ю.А.	334	Наймушина Е.А.	89
Мирзаханян А.А.	423	Налётова И.Н.	425
Миронов В.С.	13	Налимов А.Г.	452
Миронова Г.П.	59	Напольский К.С.	363, 364
Миронович А.А.	12	Насонов Н.Н.	172, 174, 187, 189
Мистонов А.А.	364	Насыров И.К.	359
Михайлов А.С.	232	Натканец И.	381
Михайлов В.И.	460	Наумов П.Г.	12, 253
Михайлова А.Б.	461	Нащекин А.В.	215
		Неволин В.К.	200
		Некипелов С.В.	122

Немковский К.С.	240, 325	Осадчий С.М.	471
Немудрый А.П.	287	Островский Б.И.	72
Несов С.Н.	168	Павлюченко В.Н.	62
Неудачина В. С.	506	Паладичева А.В.	149
Низкова А.И.	466	Палто С.П.	135
Никитенко С.Г.	217, 270	Панарин Е.Ф.	38
Никитенко Ю.В.	408	Панков К.Н.	114
Никитин А.М.	190	Панов В.И.	181
Никифоров И.Я.	456	Пантуев В.С.	516
Никогосян С.К.	191, 202	Панченко В.Я.	19
Николаев Д.П.	419	Панчук В.В.	193, 553
Николаев А.Ю.	36	Папушев П.А.	520
Николаев И.В.	70	Паринова Е.В.	194
Николенко А.Д.	507, 532	Пахневич А.В.	472
Никольский А.В.	255	Пахомова Е.Б.	406
Никонов А.А.	325	Пашаев Э.М.	128
Нистратов А.В.	173	Пашеньков А.С.	516
Новакова А.А.	39, 71, 282, 356	Пашин Д.М.	359
Новакович А.А.	336, 405	Пашкевич С.Г.	59
Новиков А.М.	372	Пашкова Т.В.	133, 142
Новиков С.Н.	467	Пашняк Н.	415
Новиков Ю.А.	223	Певзнер Б.З.	326
Новикова Н.Н.	117, 150	Перевощиков Д.А.	473
Новицкий Н.Н.	156	Перегудов Д.В.	159
Новоселова Е.Г.	192, 207, 355	Перегудова Н.Н.	113
Нокс П.П.	28	Передков С.	170
Норанович О.А.	336	Песин Л.А.	184, 195
Носик В.Л.	457, 458, 466	Петраков А.П.	225, 550
Нуриев А.В.	254	Петраков В.С.	264, 277, 320
Объедков А.М.	122	Петренко В.И.	73, 465
Овчаренко В.И.	414	Петров А.В.	464
Овчинников С. Г.	12	Петров В.В.	227
Овчинникова Е.Н.	392, 448, 463, 468, 469	Петров Д.В.	199
Оганесян А.В.	137	Петров М.Н.	413, 435
Оганесян А.С.	191, 202	Петрова Н.И.	473
Ожерельев В.В.	432	Петрова О.В.	122
Окотруб А.В.	375	Петросян А.В.	137
Олейнич-Лысюк А.В.	337	Петрунин В.Ф.	311
Олиховский С.И.	449, 458	Петрушенко Ю.Я.	474, 477
Орехов А.С.	107, 118, 163, 214	Петухов А.	364
Орехова В.П.	338	Петухов В.Ю.	49
Орешкин А.И.	181	Петухов М.Г.	31, 420, 445, 488
Орешкин С.И.	181	Пикулев В.Б.	327
Орешко А.П.	448, 463, 468, 469	Пиндюрин В.Ф.	507, 532
Орлов М.А.	470	Пирогов Б.Я.	501
Орлов Р.С.	549	Пирогова Л.С.	473
Орлов С.П.	326	Пиршин И.В.	518
Осава Э.	85	Пискулян К.И.	137
		Пич У.	415

Плетнев В.З.	74	Пудалов В.М.	318
Плетнева Н.В.	74	Пузик И.И.	282
Плешакова Т.О.	95	Пузынин И.В.	478, 487
Плешанов Н.К.	183	Пузынина Т.П.	478, 487
Пляшкевич В.А.	375	Пунегов В.И.	407
Поворознюк С.Н.	168	Пусенков В.	462
Погорельый Д.К.	508	Пушкарёв С.С.	119, 201
Погребницкий К.Ю.	269	Пушкарь Ю.Н.	281
Подковырина Ю.С.	75, 87	Пюттнер Р.	235
Подпратов С.Е.	380	Равин Н.В.	80
Подурец К.М.	379, 472, 508, 539	Раевская М.Б.	286
Поздеева Ю.С.	203	Раевский И.П.	255
Пойда А.А.	372	Райтман Э.А.	408
Полепишина А.О.	196	Ракитина Т.В.	51
Полетаев И.В.	532	Ракова Е.В.	460
Поликарпов М.А.	19	Ракшун Я.В.	536, 547, 551, 556, 558
Положенцев	255	Ральченко В.Г.	115
Поляк Л.Е.	460	Раранский Н.Д.	337, 509
Поляков А.М.	204	Расцветаева Р.К.	278
Поляков А.Н.	197, 372	Ратников В.В.	230
Поляков К.М.	76, 80	Рахимова Н.А.	173
Пономарев В.И.	540	Рашидов Д.	85
Пономаренко С.А.	127	Рашковский А.Ю.	120
Понятовский Е.Г.	250, 284	Ребрин И.Е.	39
Понятовский Л.Н.	266	Ревина А.А.	86
Попов А.Н.	16	Ревкевич Г.П.	239, 340
Попов В.А.	198	Редькин Б.С.	250
Попов В.В.	311	Решетник О.В.	449
Попов В.О.	76, 80	Роголев А.Л.	17
Попов Е.А.	474, 477	Роголёв В.А.	176, 188
Попов Ю.В.	341	Роддатис В.В.	94, 108, 250, 332
Попова Г.В.	149	Родина Е.В.	34
Полович А.Ф.	115	Родина И.С.	341
Порсев В.Е.	49	Рожавская М.М.	230
Потапов А.П.	304	Рождествина В.И.	256
Потапова Н.М.	339	Рожкова Н.Н.	83
Похил Г.П.	174	Рожнов С.В.	472
Похолок К.В.	254	Рожнова Л.Э.	59
Пракапенка В.Б.	243	Розенталь М	58
Привезенцев В.В.	199	Романов Д.П.	38
Примаченко О.Н.	62	Росляков И.В.	363
Притула И.М.	319	Рот К.	370
Приходько К.Е.	116	Рощин Б.С.	121, 185
Прокопьев Е.П.	200	Рубан О.А.	119, 201
Пронин И.И.	102	Рубин А.Б.	28
Просеков П.А.	492	Румянцева Н.А.	25
Прохоров И.А.	475	Русаков Ал. А.	515
Прядченко В.В.	397, 406, 412	Русаков В.С.	258
Пугачев К.Э.	221		

Русанов А.Л.	24	Семушкина Г.И.	32, 375
Русских А.П.	33	Семченко В.В.	292
Руткаускас А.В.	342	Сенин Р.А.	371, 510
Рыбин Д.С.	49	Сергеев А.А.	77
Рыбина А.В.	343	Сергеев Ю.И.	476
Рыженков А.В.	35	Сергиенко В.И.	172, 187
Рюль Э.	82	Серебряков Ю.А.	475
Рябенков В.И.	373	Серёгин А.Ю.	107, 128, 178, 222, 331
Рябинкин Е.А.	374	Середин П.В.	25, 111
Сутурин С.М.	215	Сивков В.Н.	67, 122
Саакян А.А.	191, 202	Сидоров В.В.	294
Сабельфельд К.К.	395	Сидоров В.С.	475
Савельев И.С.	552	Сидорова О.В.	346
Савельев С.К.	476, 552	Сиколенко В.В.	259, 343
Савенко Б.Н.	205, 244, 314, 316, 328, 329, 342, 344	Сикора А.А.	411
Савилов С.В.	198, 151	Симаков Е.А.	77
Савинский С.С.	203	Симионовичи А.	419
Савицкий Г.	415	Симонова Ж.Г.	33, 60
Саврук Е.В.	257	Синицин В.В.	250
Савченко И.В.	245	Синяткин С.В.	499
Сагалова Т.Б.	264	Сиротинкин В.П.	461
Садыков Е.В.	345	Ситников А.В.	219
Садыков Р.А.	505, 526, 527, 542, 548	Ситникова А.А.	148, 215
Сазонов А.В.	34	Скакунова Е.С.	458
Саид-Галиев Э.Е.	36	Склянчук Е.Д.	52
Салецкий А.М.	409, 417	Склярлов Л.Ю.	78
Салихов С.В.	204	Скоркин В.М.	554
Салтанаева Е.А.	477	Скуридин С.Г.	79
Самойленко С.А.	205	Слуцкая Э.С.	80
Самойлова Л.	389, 433	Случинская И.А.	299, 347
Самойлович М.И.	10	Смелова Е.М.	409, 417
Самыгина В.Р.	34	Смирнов А.Н.	230
Саркар Н.Р.	478, 487	Смирнов Д.И.	511, 549
Сархадов И.С.	478, 487, 479	Смирнов И.С.	192, 207, 355
Сафенкова И.В.	24	Смирнов Л.П.	95
Сафонова Т.Н.	76, 80	Смирнов Л.С.	381
Сафронов В.В.	513	Смирнов С.В.	257
Сахаров С.А.	252, 264, 277, 320	Смирнова Е.А.	37
Свергун Д.И.	18, 90, 92	Смирнова З.И.	106
Свечников Н.Ю.	175, 206	Смирнова И.А.	410, 514
Свешникова Л.Л.	217	Смирнова Т.П.	234
Свиридова Т.А.	294	Смирнова Ю.О.	260
Сдобняков Н.Ю.	317, 348	Смоленцев Н.Ю.	260, 411
Седов В.П.	70	Смоленцева Г.Ю.	261
Седова И.В.	159	Смоленцева Н.Ю.	261
Седых В.Д.	258	Снигирёв А.А.	363, 512, 544, 559
Семенов В.Г.	193, 553	Снигирёва И.И.	363, 512, 544, 559
		Соболев Б.П.	295, 351

Соболев В.В.	136, 208, 209, 229, 428, 444, 447, 453, 454, 473, 482	Суворова Е.И.	11, 107, 118, 119, 201
Соболев В.Вал.	208, 209, 229, 428, 444, 453, 454, 482	Суворова О.В.	86
Созонтов Е.А.	513	Сульянов С.Н.	437, 515
Сойфер В.А.	452	Сульянова Е.А.	295, 351, 515
Соколов В.В.	113	Суржик М.А.	488
Соколов Д.Н.	317, 348	Сутурин С.М.	215
Соколов М.Н.	210, 434	Суханов Л.П.	175
Соколов Н.С.	215	Сухарина Г.Б.	262
Соколова А.В.	555	Сучкова С.А.	75, 82
Солдатов А.В.	55, 66, 75, 82, 87, 170, 211, 255, 260, 261, 262, 281, 302, 341, 362, 411, 423, 531, 535	Сыромятников В.Г.	183
Солдатов А.Г.	59	Сюй А.В.	396
Солдатов М.А.	40, 75, 211, 260, 261	Табаров С.Х.	85,
Соловьев С.М.	102	Табачкова Н.Ю.	264, 320
Соломкин Ф.Ю.	118	Тазетдинов Р.Г.	139
Соменков В.А.	288, 379, 472	Талдёнков А.Н.	116
Сорокин Н.И.	351	Таранухина А.И.	405
Сорокин С.В.	159	Таргонский А.В.	492
Сорокина Н.И.	279, 349	Тароев В.К.	278
Сороколетов Д.С.	551, 556	Татевосян М.М.	298, 352
Сотниченко С.Е.	29, 81	Телешев А.Т.	52
Соцкий В.В.	402, 404	Тен К.А.	517
Срабионян В.В.	412, 493	Теплов Л.А.	302
Станкевич В.Г.	65, 175	Терехов В.А.	114, 194
Станкус С.В.	245	Терешкина К.Б.	28
Старостенков М.Д.	335	Терещенко Е.Ю.	107, 178, 222
Старчиков С.С.	350, 358	Теслюк А.Б.	376
Степанов А.С.	28	Тимофеев В.И.	37, 63
Степанова В.В.	48, 64, 65	Тимофеев В.П.	400
Степанова Т.В.	149	Тимошенков С.П.	200
Степановских Е.И.	146, 212	Тимченко Н.А.	153, 353
Степович М.А.	197, 426	Титов В.М.	520
Стеханова Т.Н.	80	Титов Н.А.	516
Стил Я.М.	271	Титов П.Л.	231
Стогний А.И.	156	Титова Л.В.	265
Столяров А.А.	505	Тихонов А.М.	121, 263
Стружкин В.В.	12, 243	Ткаль В.А.	413, 435
Струк А.Я.	467	Ткач В.Н.	145
Струк Я.М.	481	Ткаченко В.И.	313
Студенов В.Б.	159	Ткаченко В.Ф.	319
Стюарт Р.	325	Ткаченко Н. В.	107
Субботин И.А.	119, 128, 201	Ткаченко О.П.	138
Суворов Э.В.	410, 514	Тлисов Д.А.	516
		Толмачев Д.А.	38
		Толочко Б.П.	65, 502, 501, 517, 520, 521
		Толстихин И.Н.	326
		Томчук А.В.	83
		Торгов В.Г.	32

Торопова А.И.	400	Фодчук И.М.	145, 415, 449, 467, 481
Третьяков Е.В.	414	Форостяная Н.А.	220
Третьякова Н.А.	134, 216	Форш П.А.	123
Тригуб А.А.	423	Фофанов А.Д.	280, 439, 459
Трифонов А.Ю.	103, 166	Фролов К.В.	267, 318, 358
Тропин Т.В.	84	Фролов Д.А.	121
Трофимов В.Н.	557	Фролов К.В.	253
Троян И.А.	243, 253	Фунтиков Ю.В.	200
Троянчук И.	259	Фунтов К.О.	350, 358
Трубина С.В.	217, 270	Фурсова Е.Ю.	414
Трубкин Н.В.	301	Фыкин Л.Ф.	309
Трунов В.А.	62, 505	Хайдуков Ю.Н.	190, 416
Труханов А.В.	344	Хайкин С.Я.	62
Трушина Д.Б.	68, 218	Хакимов З.Н.	482
Туйчиев Ш.	85	Халид А.С.	479
Турищев С.Ю.	114, 194	Халитов З.Я.	359
Турьянский А.Г.	511, 518	Хамова Т.В.	221
Тухлиев З.К.	478, 487	Хапачев Ю.П.	442
Тытик Д.Л.	86	Харитонов Е.П.	279, 349
Тюлюсов А.Н.	403, 480	Харламова М.В.	151
Тюмина О.В.	91	Харьковский А.И.	345
Тютюнников С.И.	528, 529, 534	Хасанов С.С.	250, 268, 305, 321
Убушаева Э.Н.	354	Хачатуров В.Р.	483
Уварова С.С.	252, 264, 277, 320	Хачатуров Р.В.	124
Удовенко А.А.	256	Хвастунов С.М.	71
Удовский А.Л.	355	Хейкер Д.М.	519
Уклеев В.А.	156, 219	Хенкин Л.В.	39
Ульянов В.А.	505	Хлебников А.С.	510
Ульянова Т.М.	265	Хлыбов Е.П.	318
Ураев А.И.	291, 357	Хлыбов С.В.	123, 125
Усольцева Н.В.	161, 402, 404	Хмеленко В.В.	530
Устинов В.С.	95	Ходос И.И.	198
Ушаков В.Л.	370	Холопов М.А.	551, 556
Файн М.Б.	87	Холявка М.Г.	88
Фалкова А.Н.	356	Хохлов А.Р.	36
Фам Н.Ч.	357	Храмов Е.В.	360
Фаткуллина Л.Д.	61	Хрипунов А.К.	38
Федоренко А.Д.	32, 414	Цальный В.З.	361
Федоров В.В.	215	Цивадзе А.Ю.	143
Федоров В.И.	304	Ципенюк В.Н.	111
Федосюк В.М.	334	Цыганков П.А.	115
Федотов А.К.	194	Цыгин А.Н.	56
Федотов В.К.	266, 284, 321	Цысарь К.М.	409, 417
Федотова И.В.	155	Чайников А.П.	40, 170
Фесив И.В.	481	Чан Т.А.	344
Филатов М.В.	31, 445	Чвалун С.Н.	41, 127
Филатова И.Ю.	113	Чеботарева Н.А.	24
Филимонов Д.С.	254	Чекушин А.В.	484
Филипченко А.В.	499		

Чембелеева М.А.	222	Шевченко Г.П.	205
Чен А.Н.	485	Шевчик С.А.	370
Черепанов В.М.	19	Шевчук С.В.	224
Черепанова С.В.	287	Шелудченко Б.В.	449
Черная Т.С.	251	Шемухин А.А.	199
Черненко Ю.П.	304	Шеромов М.А.	10
Черников А.Н.	557	Шехтман Л.И.	517, 520
Черников М.А.	315	Шибряева Л.С.	45
Черников Р.В.	273, 294, 311, 333	Шикин А.М.	67, 126
Чернов В.А.	551, 547, 558	Шиков А.К.	108
Чернов И.П.	353	Шилин В.А.	70
Черных И.А.	94, 108, 214	Шилов С.В.	225
Черных П.Н.	199	Шилова О.А.	221
Чернышев Д.Ю.	242	Шифрина З.Б.	90
Чернышов А.А.	360, 365	Шишаков А.Е.	39
Чесноков В.В.	291	Шишков В.А.	543
Чижиков В.А.	392, 418	Шишковский И.В.	69, 91
Чистюнин В.Ф.	543	Шкорняков С.М.	226
Чуб Д.С.	362	Шкумат П.Н.	456
Чубарь О.	433	Шлектарев В.А.	502
Чувашова И.Г.	210, 434	Шмаков А.Н.	153, 353
Чуев М.А.	19, 128, 141	Шматко В.А.	227, 272
Чукалина М.В.	419, 486	Шмидт А.Е.	488
Чумаков А.П.	363	Шмурак С.З.	112, 250
Чумакова А.В.	364	Шмытько И.М.	112, 228
Чупова Л.А.	37	Шпак А.П.	14, 457
Чуховский Ф.Н.	204	Штыкова Э.В.	34, 36, 79, 90, 92, 218, 400
Шабанова И.Н.	89	Шубина О.И.	60
Шабельникова Я.Л.	486	Шуваева В.А.	365
Шадрин Н.С.	507	Шулаков Е.В.	324
Шайтан А.К.	42	Шуленина А.В.	47, 93
Шайтан К.В.	42	Шульга К.В.	94
Шаков А.А.	182	Шульпина И.Л.	475
Шаляпин В.Н.	529, 528, 534	Шулятев Д.А.	315
Шаманин В.В.	160	Шумакович Г.П.	53, 57
Шамрай В.Ф.	461	Шумов И.Д.	95
Шантарович В.П.	223	Шушков С.В.	229
Шарафутдинов М.Р.	65, 520, 521	Шушунов М.Н.	379
Шарафутдинова Д.Р.	49	Щеглов М.П.	230, 399
Шарипов З.А.	478, 487	Щеголева С.А.	231
Шарифова А.К.	132	Щедрин Б.М.	427, 430, 431
Шарков М.Д.	269	Щербина М.А.	41, 127
Шароян Э.Г.	423	Эккерлебе Х.	300, 339
Шаталова О.В.	45, 61	Эль-Регистан Г.И.	28
Шатрук М.М.	333	Эндрино Х.Л.	120
Шафранюка В.П.	509	Эренбург С.Б.	217, 270
Швачко О.В.	352	Юданов Н.А.	254
Шведов И.М.	117	Юдин В.В.	231
Швецов А.В.	31, 420, 488		

Юдин С.Г.	123, 125, 135, 161, 232
Юнкин В.А.	544, 559
Юрков Г.Ю.	334
Юрьев Г.С.	382
Яблонский С.В.	232
Яговкина М.А.	148, 230
Якимчук И.В.	233, 450
Яковенко Е.В.	221, 296
Яковкина Л.В.	234
Яковлев А.К.	51
Яковлев В.А.	150
Яковлева Е.В.	271
Якубович О.В.	271
Якунин С.Н.	107, 128, 178, 222
Яловега Г.Э.	227, 272
Янусова Л.Г.	430
Яремий И.	415
Ярославцев А.А.	273, 311, 333
Ярославцев А.В.	325
Ярош А.Г.	51
Яшина Л.В.	151, 235

