

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



**Совещание и Молодежная конференция
по использованию рассеяния нейтронов
и синхротронного излучения
в конденсированных средах**

RNSI-KC-2014
27–31 октября 2014 г., Санкт-Петербург

Сборник тезисов
и список участников



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

**Совещание и Молодежная конференция
по использованию рассеяния нейтронов
и синхротронного излучения
в конденсированных средах**

РНСИ-КС–2014
27–31 октября 2014 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2014

[Введите текст]

[Введите текст]

[Введите текст]

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников Совещания и Молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в конденсированных средах (РНСИ-КС-2014), 27–31 октября 2014 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the Meetings and Youth Conference on Neutron Scattering and Synchrotron Radiation in Condensed Matter (NSSR-CM-2014), (27–31 of October, 2014, St. Petersburg).

Проведению Совещания и Молодежной конференции оказали поддержку:

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

**Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»**

Российский фонд фундаментальных исследований

Санкт-Петербургский государственный университет

Сборник подготовили С. В. Григорьев и Е. С. Лихолетова.

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

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

ОГЛАВЛЕНИЕ

27 октября, день 1

Сессия I. Источники нейтронов и синхротронного излучения 5

28 октября, день 2

Сессия II. Кристаллические и магнитные структуры 9

Сессия III. Элементарные возбуждения 14

Сессия IV. Синхротронные исследования материалов 19

29 октября, день 3

Сессия V. Сильно коррелированные электронные системы 25

Сессия VI: Некристаллические материалы, полимеры и жидкости 30

Сессия VII: Биологические системы 35

30 октября, день 4

Сессия VIII: Слоистые структуры, тонкие пленки и поверхности 41

Сессия IX: Фундаментальные взаимодействия и свойства нейтрона 46

Сессия X: Приборы и методика нейтронного эксперимента 50

Сессия XI: Источники синхротронного излучения, приборы и методика синхротронного эксперимента 55

31 октября, день 5

Сессия XII: Приборы и методика нейтронного эксперимента 61

Сессия XIII: Функциональные материалы, материаловедение и прикладные исследования (энергетика, окружающая среда, геофизика, культурное наследие) 66

Сессия XIV: Комплементарные нейтронные и синхротронные исследования вещества 71

Молодежная конференция

Сессия IIIa: Биологические системы. Некристаллические материалы, полимеры и жидкости 75

Сессия Va: Кристаллические и магнитные структуры 83

Сессия VIIa: Наноматериалы 92

Сессия XIIIa: Приборы и методика нейтронного эксперимент 99

Стендовые доклады

Сессия стендовых докладов №1 107

Сессия стендовых докладов №2 172

Список участников 240



Реактор ПИК и Европейский нейтронный ландшафт

А. И. Иоффе

Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich GmbH, Garching, Germany

Реактор ПИК, с ожидаемыми нейтронными потоками на уровне современных высокопоточных реакторов, станет чрезвычайно привлекательным центром нейтронных рассеяний.

С другой стороны, Европейский нейтронный ландшафт претерпевает значительные изменения, связанные с запланированным в 2019 году вводом в строй Европейского импульсного источника нейтронов (ЕССИ) и постепенным выводом из строя стареющих стационарных реакторов. Эти изменения несомненно повышают удельный вес ПИКа в европейской шкале нейтронных ценностей.

Планируемое создание международного научного центра при реакторе ПИК и открытая пользовательская политика несомненно сделает его весьма привлекательным для исследователей со всего мира. Необходимым условием для этого, однако, является оснащение ПИКа самыми современными приборами с характеристиками по крайней мере не уступающими лучшим приборам на современных высокопоточных реакторах (ILL и FRM II).

**Комплекс спектрометров модернизированного реактора ИБР-2:
текущее состояние и перспективы развития**

Д. П. Козленко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

С момента возобновления регулярной эксплуатации модернизированного реактора ИБР-2 в 2012 г., был достигнут значительный прогресс в развитии комплекса спектрометров реактора. Помимо плановой модернизации существующих спектрометров, созданы новые установки – дифрактометр для исследования микрообразцов ДН-6, многофункциональный рефлектометр ГРЭЙНС, спектрометр нейтронной радиографии и томографии. Всего в настоящий момент комплекс спектрометров включает 14 установок. Обсуждаются дальнейшие планы развития комплекса спектрометров и актуальные научные результаты.

На комплексе спектрометров реактора ИБР-2 реализуется программа пользователей. Сбор заявок на проведение экспериментов осуществляется дважды в год, более подробная информация на сайте <http://ibr-2.jinr.ru>.

**Европейский источник синхротронного излучения:
что российские ученые получают от вступления России в ESRF?**

В. П. Дмитриев^{1, 2}

¹ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

² *Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

Главный вопрос, на который всем нам предстоит ответить, состоит не в том, *что* российские ученые *получат*? Ответ на него был известен ещё до вступления России в ESRF, так как набор инструментов и методов, представленных в Европейском синхротронном центре, хорошо известен российским исследователям. Больших изменений в связи с программами модернизации ESRF не предвидится, и мы напомним о его технических возможностях, соотнесём их с потребностями российских исследовательских групп.

Главный же вопрос состоит в том, *как* российские ученые *воспользуются* открывшимися возможностями? Важнейшим аспектом подписанного соглашения является изменение статуса российских пользователей со случайных, но полезных коллаборантов на акционеров-совладельцев центра коллективного пользования, имеющих возможность влиять в своих интересах как на его научную политику, так и на его административно-управленческую модель. О необходимых и достаточных действиях российского синхротронного сообщества, которые способствовали бы максимально эффективному использованию инструментов ESRF мы поговорим в докладе.

**X-ray free electron laser: What do we expect
from this kind of photon sources?**

S. L. Molodtsov

European XFEL, Hamburg, Germany

X-ray free electron lasers are considered now as outmost advanced tool to get deep insight into many fundamental properties of matter. One of them - the European X-ray Free Electron Laser (XFEL) is a new international research installation that is currently under construction in the Hamburg area in Germany. Large fraction of the construction costs is paid by the Russian Federation.

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 European XFEL facility. Most of it will be housed in tunnels deep below ground. 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. The world-unique feature of this XFEL is the possibility to provide up to 27.000 ultra-short flashes (10 - 100 fs) that makes the facility particular suitable for time-resolved photoemission, (resonance) inelastic X-ray scattering and imaging studies in the range of moderate and hard X-ray photons.

In this talk basics of X-ray free electron lasers as well as an overview of the European XFEL project will be provided and a review of unique experiments that are only possible at this kind of facilities will be given.

Нейтронные и синхротронные исследования оксидов со слоистыми сотообразными («honeycomb») кристаллическими структурами

А. И. Курбаков^{1,2}, В. Б. Налбандян³, Е. А. Зверева⁴, А. А. Кунцевич¹,
А. Л. Малышев¹, И. Л. Шукаев³

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

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

⁴ Московский государственный университет, Москва, Россия

Представлены дифракционные исследования новых сложных оксидов, содержащих 3d-элементы в пониженных степенях окисления и формирующие сотообразные кристаллические структуры различных видов. Образцы смешанных антимоанатов и теллуатов щелочных и переходных металлов $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$, $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$, $\text{Na}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ и $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ измерялись на нейтронных порошковых дифрактометрах SSPD (ПИЯФ, Гатчина) и G4.1 (LLB, Saclay, France) и станции ID31 ESRF.

Получено, что кристаллическая структура $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ является моноклинной $C/2m$. Упорядоченные смешанные слои магнитных ионов Co^{2+} и сурьмы Sb^{5+} чередуются с Na слоями. Разделенные по ребрам CoO_6 октаэдры образуют сотовидную ячейку.

Сначала нами было показано, что новое соединение $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, как и другие $\text{Na}_2\text{M}_2\text{TeO}_6$ ($M=\text{Mg}, \text{Co}, \text{Zn}$), является сотообразной сверхструктурой, но отличается упаковкой слоев, отвечающей пространственной группе $P6_3/mst$, а не $P6_322$, как у других представителей. Дальнейшие более прецизионные измерения и анализ указывают на то, что реально, соединение $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ оказалось смесью двух политипов – основного $P6_3/mst$ и небольшого количества $P6_322$.

Обе фазы $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ и $\text{Na}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ представляют собой сверхструктуры, производные от слоистого типа $\alpha\text{-NaFeO}_2$, с упорядочением никеля и сурьмы в слоях по сотовому типу. Эти слои имеют, в сущности, гексагональную симметрию, и порошковые рентгенограммы были первоначально проиндексированы в рамках тригональной $P3_112$ пр. гр. Затем нами было обнаружено расщепление рефлексов, однозначно доказывающее моноклинную, а не тригональную симметрию $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$ и $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$, и полнопрофильным анализом рентгеновских и нейтронных дифрактограмм установлено, что укладка слоёв в обоих случаях соответствует моноклинной $C2/m$ симметрии.

На всех составах обнаружено магнитное упорядочение разного типа со сложным конкурирующим характером магнитных взаимодействий внутри слоев и между ними, приводящее, в ряде случаев, к серии магнитных переходов, особенно при приложении внешнего магнитного поля, и сложным магнитным фазовым диаграммам.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты 14-03-01122 и 14-02-00245.

Сверхструктуры атомных смещений в кубических кристаллах $A^{II}B^{VI}$ с повышенным уровнем легирования ионами Ni и V

В. И. Максимов, С. Ф. Дубинин, Т. П. Суркова

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Исследования свойств легированных 3d- ионами полупроводниковых соединений $A^{II}B^{VI}$ обнаруживают уникальные тонкие эффекты, обусловленные sp – d взаимодействиями (см., например, [1]).

В представляемой работе методом дифракции тепловых нейтронов при комнатной температуре проведено детальное исследование особенностей кристаллической структуры объёмных кристаллов с основным структурным мотивом цинковой обманки $Zn_{0.9}Ni_{0.1}S$, $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$ и $Zn_{0.997}Ni_{0.003}Te$. Дифракционные картины образцов указанного состава наряду с рефлексами ГЦК-фазы показали систему диффузных максимумов сверхструктуры атомных смещений с волновыми векторами $k = (1/3 \ 1/3 \ 1/3) 2\pi/a$ (a – параметр кубической элементарной ячейки). Одновременно с коротковолновыми эффектами, на картинах рассеяния присутствуют признаки сформированности микрообластей неоднородных искажений структуры, длинноволновых модуляций. Данные, указывающие на существование выраженной тенденции к радикальному понижению симметрии решётки при повышении уровня легирования примесью с сильным дестабилизирующим влиянием, получены только на кристалле $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$.

По нашему мнению, в основе формирования коротковолновых модуляций в рассмотренных соединениях II-VI с повышенным содержанием Ni и V лежит тенденция к ГЦК \leftrightarrow ГПУ реконструктивному фазовому переходу, в котором ведущую роль играют смещения атомов исходной кристаллической решётки. Локальные области неоднородных атомных смещений в структуре могут индуцироваться чужеродными ионами с недостроенной 3d- оболочкой и являться базой для зарождения длинноволновых эффектов, реализуя возможности к формированию микродеформаций с результирующей направленностью на понижение симметрии. При этом структурное состояние рассматриваемых кристаллов имеет сходство с состояниями, предполагающими выделение мартенситной фазы. Работа выполнена с использованием УНУ “ИВВ-2М НМК ИФМ” по теме института “Поток” при частичной финансовой поддержке программы исследований УрО РАН “Фундаментальные проблемы физико-технических наук” (проект № 12-Т-2-1006).

1. H. F. Li, et al., Sci. China Phys. Mech. Astron. 54, 1796 (2011).

**Оксидные сегнетоэлектрики при высоком давлении:
структурный аспект**

*С. Е. Кичанов¹, С. Г. Джабаров^{1,2}, Д. П. Козленко¹, Б. Н. Савенко¹,
Е. В. Лукин¹, А. И. Мамедов², Р. З. Мехдиева²*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

Определение взаимосвязи между физическими свойствами материалов и особенностями структурного строения, микроскопических механизмов физических явлений, которые могут лечь в основу разработки промышленных технологий, является важнейшей задачей современной физики конденсированного состояния. Физические свойства сегнетоэлектрических материалов напрямую связаны с особенностями их строения на атомарном уровне: спонтанная электрическая поляризация в рассматриваемых материалах является следствием смещений атомов из электронейтральных равновесных положений, а важная информация для выявления и объяснения механизмов формирования сегнетоэлектрического состояния может быть получена в результате исследования кристаллической структуры при вариации структурных параметров. Структурные исследования при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла, межатомных расстояний и углов с изменениями магнитной структуры и макроскопических физических свойств, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений.

В докладе представлены результаты исследования кристаллической структуры ряда оксидных сегнетоэлектриков: PbTiO_3 , NaNbO_3 , Pb_2MgWO_6 и BiMnO_3 при высоком давлении методами нейтронной и рентгеновской дифракции. Представлены новые данные по исследованию Р-Т фазовых диаграмм этих соединений, о новых фазах высокого давления, об эволюции сегнетоэлектрических или антисегнетоэлектрических фаз данных оксидов при высоком давлении.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-02-00948-а.

**The sign of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction
vs atomic structure of weak ferromagnets: theory and measurement**

*V. E. Dmitrienko¹, E. N. Ovchinnikova², S. P. Collins³, G. Nisbet³, G. Beutier⁴,
Y. O. Kvashnin⁵, V. V. Mazurenko⁶, A. I. Lichtenstein⁷, M. I. Katsnelson⁸,
F. de Bergevin⁵, J. Kokubun⁹, A. Rogalev⁵*

¹ *A.V. Shubnikov Institute of Crystallography RAS, Moscow, Russia*

² *M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

³ *Diamond Light Source Ltd, Harwell Science and Innovation Campus, Didcot, UK*

⁴ *SIMaP, CNRS-Grenoble-INP-UJF,*

⁵ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

⁶ *Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia*

⁷ *Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg, Hamburg, Germany*

⁸ *Institute for Molecules and Materials, Radboud University Nijmegen, The Netherlands*

⁹ *Tokyo University of Science, Noda, Chiba, Japan*

The spin-orbit Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction $E_{DM}=D*[s_1 \times s_2]$ can induce weak ferromagnetism by small canting of neighboring magnetic moments s_1 and s_2 in antiferromagnets. The local direction of the DM vector D has been experimentally determined for the first time in the canted antiferromagnetic $FeBO_3$ crystal [1]. The technique of interference between magnetic and resonant channels in synchrotron x-ray scattering was exploited. The phase of antiferromagnetic ordering (and scattering) was fixed by external magnetic field and the phase of resonant scattering was calculated with FDMNES program. Similar experiments have been also performed for $MnCO_3$ and $CoCO_3$ crystals. For Fe_2O_3 hematite crystal, the technique of interference between magnetic and multiple diffraction channels has been used.

The experimental measurements are supported by *ab initio* calculations of the DM interaction. The first-principles calculations have been performed with Local Density Approximation incorporating the on-site Coulomb interaction U and the Spin-Orbit coupling (LDA+U+SO) [2,3]. It was found how DM interaction depends on displacements of oxygen atoms. These experimental and theoretical approaches open up new possibilities for exploring, modeling and exploiting novel magnetic and multiferroic materials.

VED and ENO are grateful to the RFBR project No. 13-02-00760 and to project № 24 of Presidium RAS. The work of VVM is supported by the grant program of President of Russian Federation MK-5565.2013.2, the contracts of the Ministry of education and science 14.A18.21.0076 and 14.A18.21.0889. MIK acknowledges a financial support by FOM (The Netherlands).

1. V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins *et al.*, *Nature Phys.* 10, 202 (2014).
2. V. V. Mazurenko, V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B*, 71, 184434 (2005).
3. M. I. Katsnelson, Y. O. Kvashnin, *et al.* *Phys. Rev. B*, 82, 100403 (2010).

**О роли взаимодействия Дзялошинского – Мория
в мультиферроиках $R\text{Mn}_2\text{O}_5$** *И. А. Зобкало, С. В. Гаврилов**Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия*

Семейство редкоземельных манганатов $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ (R – редкоземельный элемент) вызывает в последнее время серьезный интерес, поскольку в нем магнитоэлектрические связи проявляются в разнообразных впечатляющих эффектах. Это обстоятельство является чрезвычайно привлекательным с точки зрения их потенциального использования в различных областях спинтроники.

Для объяснения механизма (-ов) происхождения магнитоэлектрического взаимодействия в мультиферроиках $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ рассматриваются различные модели, основанные, главным образом, на двух типах обменного взаимодействия: симметричного гейзенберговского обмена, описываемого скалярным произведением спинов взаимодействующих ионов ($S_1 \cdot S_2$) [1] и антисимметричного обмена Дзялошинского-Мория, описываемого векторным произведением $[S_1 \times S_2]$ [2].

В контексте выяснения микроскопических механизмов магнитоэлектрических взаимодействий в $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ проведены нейтронные исследования на монокристаллах мультиферроиков TbMn_2O_5 , $\text{Tb}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Mn}_2\text{O}_5$, а также несегнетоэлектрического соединения NdMn_2O_5 . Использовались методы дифракции поляризованных нейтронов, включая XYZ-поляризационный анализ.

Результаты наших исследований показывают, что в мультиферроиках TbMn_2O_5 , $\text{Tb}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Mn}_2\text{O}_5$ взаимодействие Дзялошинского-Мория обеспечивает нецентросимметричность соединений во всех магнитоупорядоченных фазах [3]. При этом в различных фазах магнитного упорядочения величина этого взаимодействия остается постоянной. В несегнетоэлектрическом изоструктурном кристалле NdMn_2O_5 этого не наблюдается [4].

Это свидетельствует о том, что именно взаимодействие вида $[S_1 \times S_2]$ обуславливает существование электрической поляризации, по крайней мере, в слабоферроэлектрических фазах, и согласуется с выводами в работах по YMn_2O_5 [5].

1. P.G. Radaelli, L.C. Chapon, J. Phys.: Condens. Matter. 20, 434213 (2008).
2. I.A. Sergienko, E. Dagotto, Phys. Rev. B. 73, 094434 (2006).
3. И.А. Зобкало, С.В. Гаврилов и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2014, принято в печать.
4. I.A. Zobkalo, S.V. Gavrilov, et al., J. Magn. Magn. Mater. 354, 85 (2014).
5. Kimura H., Sakamoto Y., et al., Phys. Rev. B. 87, 104414 (2013).

**Phonon dispersion in symmetry related crystal structures:
metallic phases in Sn**

A. Ivanov¹, Al. Szakal², A. Rumiantsev³

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

² *Wigner Research Centre for Physics, Budapest, Hungary*

³ *Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

In the case of the phase transitions of the 1st order the relation between phonon spectra of the two phases may be not evident. A good starting point for such a comparison can be orientation relations between the crystal lattices of the two phases. Mathematically these orientation relations can be expressed through the existence of a common symmetry subgroup for symmetry groups describing structures of both phases. Using this approach we analyze the phonon dispersion in the two phases of metallic tin – the well known beta-Sn (called white tin) with a tetragonal space group and two atoms in the primitive cell and the other phase, called gamma-Sn, with a less common simple-hexagonal crystal structure with one atom in the primitive cell. The orientation relations between the two structures find their justification in the existing low-frequency vibration modes in the two structures. We complemented the existing experimental data with our more detailed measurements of the phonon dispersion in the two metallic phases of tin in order to compare the full sets and show the way in which different branches of the two phases should be compared. We notice that certain branches drastically change at the transition while the others remain practically unchanged in the whole Brillouin zone. A half of the 6 braches in the two-atomic white tin transforms to branches at the zone boundary in one-atomic gamma-tin with their correspondence described by the inelastic structure factors (or eigenvectors of phonon modes). A virtual transition from one structure to another is simulated with the help of a simple lattice dynamics model which takes into account the symmetry correspondence of the crystals structures of the tin phases.

New challenges in the Kondo-insulator physics: the 1-2-10 family

J.-M. Mignot^{1,}, J. Robert¹, S. Petit¹, P. A. Alekseev^{2,3}, K. Saito^{1,†}, P. Steffens⁴,
T. Nishioka⁵, M. Matsumura⁵, R. Kobayashi^{6,‡}, H. Tanida⁶,
D. Tanaka⁷, and M. Sera⁷*

¹ *Laboratoire L'eon Brillouin, CEA-CNRS, CEA/Saclay, France*

² *National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*

³ *National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow, Russia*

⁴ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

⁵ *Graduate School of Integrated Arts and Science, Kochi University, Kochi, Japan*

⁶ *Neutron Science Laboratory, ISSP, University of Tokyo, Tokai, Japan*

⁷ *Department of Quantum Matter, ADSM, Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, Japan*

Kondo insulators (KI) form an important class of strongly correlated electron systems [1]. Their ground state is typically a nonmagnetic singlet, with a spin-gap in the spectrum of magnetic excitations. However, it has been shown that residual antiferromagnetic (AFM) correlations can result in unconventional spin-dynamical properties, such as the resonancelike exciton peak found in YbB12. The possible competition between the KI state and a long-range AFM order is an interesting, yet unsettled, issue.

The 1-2-10 family of orthorhombic Ce compounds CeM₂Al₁₀ (M: Fe, Ru, Os) offers a unique opportunity to study this phenomenon, since changing the transition metal element drives the electronic system from a genuine KI behavior (CeFe₂Al₁₀) to a more complex situation in which the development of the KI state is hindered by the onset of AFM order (CeRu₂Al₁₀, CeOs₂Al₁₀). The AFM state itself has a number of unconventional properties, which have led, among others, to the suggestion that these materials are located close to a localized-to-itinerant transition [2]. Detailed neutron scattering studies [3-6] of their magnetic order and dynamics provide novel insight into the microscopic mechanisms at play.

† Present address: Institute of Materials Structure Science, KEK, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan.

‡ Present address: Quantum Condensed Matter Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, USA.

* e-mail: jean-michel.mignot@cea.fr

1. P. Riseborough, *Adv Phys* 49, 257 (2000); P. Coleman, arXiv 12006 (2006), and references therein.

2. S. Hoshino and Y. Kuramoto, *Phys. Rev. Lett.* 111, 026401 (2013).

3. J. Robert, J.-M. Mignot, G. Andr'e, T. Nishioka, R. Kobayashi, M. Matsumura, H. Tanida, D. Tanaka, and M. Sera, *Phys. Rev. B* 82, 100404(R) (2010).

4. J.-M. Mignot, M. Matsumura, J. Robert, G. Andr'e, A. M. Bataille, T. Nishioka, R. Kobayashi, H. Tanida, D. Tanaka, and M. Sera, *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* 80SA, SA022 (2011).

5. J. Robert, J.-M. Mignot, S. Petit, P. Steffens, T. Nishioka, R. Kobayashi, M. Matsumura, H. Tanida, D. Tanaka, and M. Sera, *Phys. Rev. Lett.* 109, 267208 (2012).

6. J.-M. Mignot, M. Matsumura, P. A. Alekseev, J. Robert, S. Petit, T. Nishioka, R. Kobayashi, H. Tanida, H. Nohara, and M. Sera, *Phys. Rev. B* 89, 161103(R) (2014).

**Влияние температуры и давления на фононный спектр
узкощелевого полупроводника FeSi**

*П. П. Паршин¹, П. А. Алексеев^{1, 2}, К. С. Немковский³, J. Perβon⁴,
Л. Дубровинский⁵, А. Кантор^{5, 6}, А. И. Чумаков^{5, 1}, R. Ruffer⁵,*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

³ Jülich Centre for Neutron Science, Forschungszentrum Jülich GmbH, Outstation at FRM II, Garching, Germany

⁴ Jülich Centre for Neutron Science JCNS and Peter Grünberg Institut PGI, JARA-FIT Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, Germany

⁵ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁶ Bayerisches Geoinstitut, Bayreuth, Germany

Методом ядерного резонансного неупругого рассеяния синхротронного излучения измерены парциальные спектры тепловых колебаний атомов железа в моносилициде FeSi – узкощелевом полупроводнике с сильными электронными корреляциями. Измерения выполнены в широком диапазоне температур (46 – 297 К) и давлений (0.5 – 43 ГПа). Установлено аномальное, зависящее от энергии фононов и диапазона изменения внешних параметров, ужесточение спектра при понижении температуры и увеличении давления.

Полученные данные анализируются в рамках представлений, связывающих изменение спектра колебаний атомов железа с эволюцией характерного для основного состояния FeSi щелевого электронного спектра. Результаты показывают, что перестройка спектра атомных колебаний железа, в том числе и аномальная чувствительность энергии фононов к температуре и давлению, обусловлены, в основном, изменением объёма элементарной ячейки соединения.

Работа поддержана грантами РФФИ 14-02-00272а и РФФИ 14-22-01002 ОФИ_м.

E-mail: Parshin_PP@nrcki.ru

Квазиклассический анализ магнонов в ферромагнетике со скирмионом

Д. Н. Аристов^{1,2}

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

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

Изучается изменение спектра магнонов в гейзенберговском ферромагнетике (ФМ) в случае, когда основное состояние является скирмионным. [1] Мы рассматриваем модельный случай одного скирмиона, такое основное состояние выше по энергии чем обычное ФМ упорядочение и метастабильно в отсутствие взаимодействий, дополнительных к основному обмену [2]. Мы применяем квазиклассический подход для анализа дисперсии возбуждений-магнонов, начиная с решеточной модели, находя локальный минимум классической энергии и выполняя $1/S$ разложение по обратному спину. В обычном ферромагнетике дисперсия магнонов $E_k = Dk^2$ и волновые функции - плоские волны. В скирмионной конфигурации магноны описываются уравнением Шредингера с центральным потенциалом. Показано, что существуют нетривиальные решения этого уравнения с нулевой энергией, соответствующие симметрии скирмионного решения. Это трансляция скирмиона, преобразование масштаба (размера скирмиона) и т.н. специальное конформное преобразование. Полученные аналитические результаты дают качественное понимание ситуации и закладывают основу для анализа более реалистичных моделей, и для последующего описания рассеяния нейтронов в таких сложных магнитоупорядоченных объектах.

1. X. Z. Yu et al., Nature 465, 901 (2010).

2. A. V. Butenko et al., Phys. Rev. B 80, 134410 (2009).

**Резонансное неупругое рассеяние рентгеновского излучения
в исследовании оксидов переходных металлов**

В. Ю. Юшанхай¹, Л. А. Сюракшина²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, ЛТФ, Дубна, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, ЛИТ, Дубна, Россия

Совершенствование экспериментальной базы и инструментальный прогресс в последние годы открыли новые возможности для измерения низкоэнергетических спектров электронных, спиновых и орбитальных возбуждений в сильнокоррелированных электронных системах методом резонансного неупругого рассеяния рентгеновского излучения (RIXS).

В докладе обсуждаются теоретические подходы к данной проблеме, а также представлен краткий обзор результатов недавних RIXS измерений спектральных свойств оксидов *3d* и *5d* переходных металлов.

Особо обсуждается применение метода кластерного *ab initio* квантово-химического расчета мультиплетной структуры ионов переходных металлов для интерпретации RIXS спектров локальных *d-d* возбуждений в оксидах *3d* переходных металлов [1].

1. V. Yushankhai, L. Siurakshina, Int. J. Mod. Phys. B 27, 1350185 (2013).

Магнитохиральный дихроизм в рентгеновском поглощении

A. Pogalev¹, F. Wilhelm¹, A. Bocak¹, R. Sessoli²

¹ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

² *Università degli Studi di Firenze & INSTM RU, Sesto Fiorentino, Italy*

Системы, в которых нарушена симметрия, являются привлекательными объектами исследований не только в физике но также в химии и в биологии. Нарушение симметрии проявляется в различных оптических явлениях и, следовательно, взаимодействие света с веществом является наиболее мощным инструментом экспериментальных исследований. Два наиболее ярких примера: магнито-оптический эффект и естественная оптическая активность. Магнито-оптическая активность (эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм) связана с нарушением симметрии обращения времени и возникает в результате частотной дисперсии. Естественная оптическая активность и естественный круговой дихроизм являются в свою очередь проявлением пространственной дисперсии и могут наблюдаться только в тех системах у которых нет центра инверсии, как например хиральные среды. Хотя в основе магнито-оптического эффекта и естественной оптической активности лежат принципиально разные физические механизмы, их проявление совершенно аналогично в однородных средах, а именно вращение плоскости поляризации света или круговой дихроизм. Именно это сходство и побуждало многих выдающихся ученых искать связь между магнетизмом и хиральностью в течение более ста лет, но тщетно.

Магнитохиральный эффект в оптике конденсированных сред (магнитохиральный дихроизм) был впервые предсказан в 1962 году [1] и может наблюдаться только в системах где одновременно нарушены симметрия обращения времени и симметрия пространственной инверсии. Этим же условиям удовлетворяют магнитоэлектрические среды и мультиферроики, поэтому магнитохиральный дихроизм наиболее ярко должен проявляться именно в этих системах. Экспериментально он был впервые исследован только в 1997 году, используя видимый свет [2], а в 2002 году он был обнаружен и в рентгеновских спектрах поглощения магнитоэлектрического кристалла Cr_2O_3 [3].

Основные свойства магнитохирального дихроизма, которые могут быть получены из симметричных соображений, представлены в настоящей работе для спектров в видимой и рентгеновской областях. Приведен также обзор экспериментальных результатов измерения магнитохирального дихроизма на К-краях поглощения переходных металлов в различных системах: 1) в парамагнитном хиральном сегнетоэлектрике $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$; 2) в монокристаллах ферроэлектрического слабого ферромагнетика GaFeO_3 и 3) в молекулярных хиральных магнитах на основе одномерных цепочек Co или Mn. Экспериментальные спектры проанализированы с использованием

правил сумм [4], которые связывают интеграл магнитохирального дихроизма с тороидальным моментом поглощающих атомов.

1. M.P. Groenewege, Mol. Phys. 5, 541 (1962).
2. G.L.J.A. Rikken and E. Raupach, Nature 390, 493 (1997).
3. J. Goulon, A. Rogalev, et al., Phys. Rev. Lett. 88, 237401 (2002).
4. P. Carra, A. Jerez, I. Marri, Phys. Rev. B 67, 045111 (2003).

Синхротронные исследования материалов в экстремальных условиях высоких давлений, высоких и криогенных температур

И. С. Любутин¹, А. Г. Гаврилюк^{1, 2}

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

В докладе представлен краткий обзор методик и экспериментальных результатов по исследованию материалов в экстремальных условиях синхротронными методами. Уникальные свойства синхротронного излучения использованы для изучения свойств материалов в камерах высокого давления с алмазными наковальнями. Разработаны экспериментальные методики для изучения свойств веществ в условиях сверхвысоких давлений (до 3 Мб), высоких (до 6000 К) и криогенных (до 2.4 К) температур, а также в сильных магнитных полях (до 9 Т). Методики адаптированы для синхротронной мессбауэровской спектроскопии (NFS), рентгеновской дифракции с высоким пространственным разрешением, синхротронной рентгеновской эмиссионной спектроскопии (XES), для резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS). С помощью разработанных методик получены новые результаты и обнаружены новые эффекты в области фазовых переходов для магнитных, структурных и электронных свойств материалов, а также синтезированы новые фазы в экстремальных условиях [1]. Обнаружен и тщательно исследован эффект спинового кроссовера и сопровождающие его явления в соединениях на основе оксидов переходных металлов [2], обнаружен новый механизм моттовского перехода диэлектрик-металл [3], синтезирован новый уникальный высокоэнергетический материал на основе полимерного азота [4], экспериментально открыт переход диэлектрик-металл в NiO при сверхвысоком давлении (2.4 Мб) [5], подробно исследованы фазовые диаграммы множества систем с сильной корреляцией электронов, изучены свойства ряда минералов в условиях нижней мантии Земли [6].

Разработанные методики активно используются и совершенствуются, активно ведётся их внедрение и адаптация на новых синхротронах, в том числе, и в сотрудничестве с зарубежными коллегами.

1. I.S. Lyubutin, A. G. Gavriiliuk, *Physics-Uspekhi* 52, 989-1017 (2009).
2. I.S. Lyubutin, S.G. Ovchinnikov, A.G. Gavriiliuk, V.V. Struzhkin, *Phys. Rev. B* 79, 085125 (2009).
3. A.G. Gavriiliuk, V.V. Struzhkin, I.S. Lyubutin, S.G. Ovchinnikov, M.Y. Hu, and P. Chow, *Phys. Rev. B* 77, 155112 (2008).
4. M. I. Eremets, A. G. Gavriiliuk, I. A. Trojan, D. A. Dzivenko, R. Boehler, *NATURE Materials* 3, 558 (2004).
5. A. G. Gavriiliuk, I. A. Trojan, V. V. Struzhkin, *Phys. Rev. Lett.* 109, 086402 (2012).
6. I. S. Lyubutin, V.V. Struzhkin, A. G. Gavriiliuk, et al. *PNAS* 110, 7142 (2013).

Структура и свойства новых суперпротоников $Cs_mH_n((HSO_4)_n, (H_2PO_4))_{m+n}$ *И. П. Макарова, Е. В. Дмитричева, В. В. Гребенев, В. А. Коморников**Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

Растущие темпы энергопотребления стимулируют интерес к разработкам альтернативных источников энергии, включая исследования в области водородной энергетики. Для непосредственного получения электрической энергии созданы специальные устройства – топливные элементы, обеспечивающие преобразование химической энергии в электрическую. Основным компонент этих элементов – ион-проводящая мембрана. Многообещающее направление связано с созданием материалов для протон-обменных мембран, работающих при умеренных температурах 150-400°C. Из известных материалов таким требованиям удовлетворяют кристаллы суперпротоников $Me_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2}$ ($Me = K, Rb, Cs, NH_4$; $X = S, Se, P$).

Эти кристаллы являются уникальными в классе протонных проводников, так как их проводимость связана со структурными особенностями, а не с допирующими добавками. Полученные данные об атомной структуре этих кристаллов позволяют сделать вывод о возможном существовании в них различных структурных механизмов изменений физических свойств: формирование динамически разупорядоченной системы водородных связей с энергетически эквивалентными позициями H [1], образование многофазного состояния, формирование системы водородных связей, часть которой динамически разупорядочена, с одновременным формированием каналов для движения ионов Me [2].

В последние годы активно изучаются смешанные системы суперпротоников CsH_2PO_4 – $CsHSO_4$. В ИК РАН впервые систематически исследована фазовая диаграмма тройной системы CsH_2PO_4 – $CsHSO_4$ – H_2O , на основании которой удалось синтезировать новое соединение и вырастить новый монокристалл $Cs_6H(HSO_4)_3(H_2PO_4)_4$ [3]. Исследования показали, что монокристалл переходит в суперпротонную фазу, и при относительно невысокой температуре ~120°C его проводимость достигает значения $10^{-2} \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$. Высокотемпературная суперпротонная фаза этого кристалла сохраняется при охлаждении достаточно долго без существенного снижения проводимости, что представляется особенно привлекательным для практических применений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-03-12216).

1. И.П. Макарова, Т.С. Черная, А.А. Филаретов и др., Кристаллография 55(3), 429 (2010).
2. I. Makarova, V. Grebenev, E. Dmitricheva, et.al., Acta Cryst. B70, 218 (2014).
3. В.В. Гребенев, И.П. Макарова, Д.А. Ксенофонов и др., Кристаллография 58(6), 896 (2013).

Структура нанокластеров золота в полостях молекул кукурбит(н)урила по EXAFS и HERFD спектрам

*С. Б. Эренбург¹, С. В. Трубина¹, Е. А. Коваленко¹, О. А. Герасько¹,
В. И. Зайковский², К. О. Квашина³*

¹ *Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия*

³ *European Synchrotron Radiation Facility, ID26, Гренобль, Франция*

Известно, что при переходе от массивных твердотельных объектов к наночастицам меняются их характерные физические и химические свойства. В частности, установлено, что некоторые металлы в высокодисперсном состоянии активны в таких реакциях, в которых массивные металлы слабо или вообще не активны [1].

Проведен синтез соединений включения наночастиц золота в молекулы кукурбит[*n*]урила (Au@CB[*n*], *n* = 6, 7) [2]. Для синтезированных соединений в районе AuL_{III}-краев поглощения измерены спектры EXAFS-, XANES- и HERFD XAS. Методом просвечивающей электронной микроскопии (HRTEM) проведен контроль топологии исследуемых систем. Проведен сравнительный анализ данных, полученных для соединений включения Au@CB[7], Au@CB[6], для эталонного образца массивной золотой фольги и образцов высоко-дисперсного золота, синтезированных ранее другими методами [1].

Установлено, что во всех образцах золото имеет бидисперсное распределение: 1) высокодисперсная часть золота внутри полостей кукурбитурила с узким распределением по размерам и 2) более крупные частицы золота. Для кластеров золота внутри полостей кукурбитурилов: 1) CB[7] - координационные числа N_{Au-Au} ~6, средний размер кластеров золота *d* ~0.8 нм; 2) CB[6] - N_{Au-Au} ~5, средний размер кластеров *d* ~0.7 нм.

Обнаружено, что кластеры золота в полостях кукурбитурилов CB[7] и CB[6] характеризуются заметно меньшими (на ~0.03 Å) межатомными расстояниями и заметно большими (в три раза при 12 К) значениями фактора Дебая-Валлера по сравнению с массивным золотом. Таким образом, установлено, что структурные напряжения и разупорядочение кристаллической структуры становятся существенными для малых частиц золота, что может определять изменение его химической активности при диспергировании.

Работа поддержана Минобрнауки России и РФФИ (грант 12-02-00262а).

1. S.V. Erenburg, V.L. Moroz, N.V. Bausk, et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 575 (2007) 105–108.

2. Эренбург С.Б., Трубина С.В., Коваленко Е.А. и др. Письма в ЖЭТФ, 2013, том 97, вып. 5, с. 326–330.

**Рентгеновский фотоэффект: новые возможности адресной доставки
лучевой энергии в безрадионуклидной брахитерапии**

Е. А. Созонтов¹, В. В. Сафронов², М. В. Ковальчук¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Филиал Института кристаллографии РАН

Научно-исследовательский центр «Космическое материаловедение», Калуга, Россия

Фотоэффект является доминирующим физическим механизмом взаимодействия низкоэнергетического (несколько кэВ) рентгеновского излучения с конденсированными средами [1]. Регистрация и анализ вторичных процессов: флуоресцентного излучения, фото- и Оже-электронов при фотоэлектрическом поглощении рентгеновских лучей в условиях брэгговской дифракции позволяет полностью решить задачу спектроскопической характеристики примесных атомов и их локализации в кристаллической решетке с субангстремной точностью [2].

Основная цель и мотивация данной работы состоит в проработке общего подхода и физических основ, а также вычислительной апробации нового метода рентгеновской безрадионуклидной брахитерапии на основе использования квазимонохроматического рентгеновского флуоресцентного излучения генерируемого вторичной мишенью встроенной в специальный зонд с интегрированной рентгеновской оптикой, который может быть малоинвазивно имплантирован в биологическую ткань.

Предложены концепция и прототип экспериментальной лабораторной установки для облучения клеточных культур и лабораторных животных для изучения действия малых и сублетальных доз. Проведена характеристика методом Монте Карло миниатюрного источника характеристического рентгеновского излучения на основе имплантируемого зонда. По разработанной методике [3] было рассчитано и экспериментально измерено пространственное распределение мощности дозы для различных вторичных мишеней. Было показано, что непосредственно вблизи поверхности зонда мощность дозы превосходит 1 Гр/мин, что сопоставимо с дозами, доставляемыми радионуклидными аппликаторами [4]. Данный метод может быть эффективным инструментом в радиационной биологии и медицине для внутритканевого облучения новообразований, в том числе для интраоперационных лучевых воздействий.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-02-01284 а.

1. М.А. Румш, Рентгеновский фотоэффект массивных катодов, Л.: Изд-во Ленинградского государственного университета, -55 с. (1962).

2. М.В. Ковальчук В.Г. Кон, УФН, 149, №1, pp. 69-103 (1986).

3. В.В. Сафронов, Е.А. Созонтов, Г. Гутман, Кристаллография, 58, № 3, с.366 (2013).

4. T.F. DeLaney, G.T. Chen, et al., Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys., 57, p. 239 (2003).

**Нейтронная спектроскопия валентно-нестабильных
сильнокоррелированных систем на основе редкоземельных
соединений: сосуществование дальнего магнитного порядка
и спиновых флуктуаций**

П. А. Алексеев

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В большинстве редкоземельных интерметаллидов локализованные f-электроны участвуют в формировании дальнего магнитного порядка при понижении температуры, и с ними связан упорядоченный магнитный момент на редкоземельном ионе. Однако, в случае, когда в качестве редкоземельного иона выступают Ce, Sm, Eu, Tm, Yb, часто, вместо дальнего магнитного порядка, возникает более сложное основное состояние, известное как промежуточновалентное, характеризуемое подавлением магнитного момента на редкоземельном ионе за счет сильных (энергия порядка 10...1000К) спиновых флуктуаций в условиях формально нецелочисленного заполнения f-оболочки.

При более общем рассмотрении оказывается, что сильнокоррелированные электронные системы (СКЭС), в частности редкоземельные соединения, демонстрируют широкий спектр типов основного состояния. В нем присутствуют достаточно экзотические сочетания свойств, такие как: магнитный порядок в исходно немагнитной системе; магнитный порядок + сверхпроводимость + валентная нестабильность, и т.п. Физическая подоплека таких проявлений свойств электронной подсистемы может быть изучена на основе детальных нейтронных исследований, прежде всего – методами магнитной спектроскопии и дифракции.

В докладе представлены предшествующие и современные результаты в этой области для некоторых редкоземельных интерметаллидов. В частности, приводятся результаты исследования системы $\text{EuCu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$, где обнаружено, что в достаточно значимом диапазоне соотношения Si/Ge спиновые флуктуации в режиме однородной промежуточной валентности для европия сосуществуют с дальним магнитным порядком. Эксперименты выполнены с использованием ряда взаимодополняющих методик: рентгеновской спектроскопии поглощения и изомерного сдвига в эффекте Мёссбауэра, магнитного неупругого рассеяния и дифракции нейтронов. Обсуждаются возможные механизмы обнаруженного явления.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант 14-22-01002 офи-м, грант 14-02 00272а.

e-mail: pavel_alekseev-r@mail.ru

Структурные фазовые переходы со скачком объема в f-электронных сильно коррелированных системах

*А. В. Мирмельштейн¹, А. А. Подлесняк², А. И. Колесников², А. М. дос Сантос²,
Б. Сапаров², А. С. Сефат², Дж. Г. Тобин³*

¹ РФЯЦ–ВНИИТФ, Снежинск, Россия

² Окриджская Национальная лаборатория, Окридж, Теннесси, США

³ Лоуренс-Ливерморская Национальная лаборатория, Ливермор, Калифорния, США

Переход между локализованным и коллективизированным поведением представляет собой актуальную проблему физики СКЭС. Такой переход в системе 5f электронов является центральным событием в актинидной серии, в тяжелой части которой 5f электроны ведут себя как локализованные, а в легких актинидах они более делокализованы. Переход происходит вблизи Pu и Am. Количественное и исчерпывающее описание этого явления еще не достигнуто [1]. В лантанидах, в которых 4f орбитали пространственно менее протяженны, чем 5f в актинидах, переход локализация/делокализация происходит в начале (вблизи церия), в середине (Sm) и в конце (Yb) PЗ ряда. Изменение температуры или давления приводят к делокализации 4f состояний и, в некоторых случаях, к структурным фазовым превращениям, сопровождающимся скачком объема. Наиболее известным примером является изоструктурный $\gamma \rightarrow \alpha$ фазовый переход в церии. Подобные переходы с изменением объема происходят и в соединениях на основе Yb, например, в $\text{Yb}_{1-x}\text{In}_x\text{Cu}_2$ [2]. Механизмы этих переходов требуют дальнейшего изучения [3]. Еще больше загадок таит в себе $\delta \rightarrow \alpha$ переход в плутонии, особенно $\delta \rightarrow \alpha'$ превращение в стабилизированной галлием гцк фазе плутония [4].

В 4f-СКЭС также встречаются неординарные ситуации. Примером является соединение CeNi, испытывающее индуцированный давлением структурный фазовый переход со скачком объема [5]. Нейтронные и синхротронные исследования позволили определить структуру фазы высокого давления CeNi, остававшуюся неизвестной с 1985 г. [6].

1. J.G. Tobin, K.T. Moore, B.W. Chung et al., Phys. Rev B 72, 085109 (2005).
2. I. Felner and I. Nowak, Phys. Rev. B 33, 617 (1986).
3. B. Chakrabarti, M.E. Pezzoli et al., arXiv: 1401.1245v1 [cond-mat.str-el] 7 Jan 2014.
4. S. Conradson et al., Phys. Rev. B 89, 224102 (2014).
5. D. Gignoux and J. Voiron, Phys. Rev. B 32, 4822 (1985).
6. A. Mirmelstein et al., ACNS 2014, Program & Exhibit Guide, p. 71.

**Рекордный объемный коллапс при фазовом переходе
в валентно-нестабильной системе**

Е. С. Клементьев^{1, 2, 3}, А. В. Цвященко², Ю. Б. Лебедь¹, Я. В. Зубавичус²,
Д. П. Козленко⁵, И. А. Бобриков⁵, А. М. Балагуров⁵

¹ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

² Балтийский федеральный университет, Калининград, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

⁴ Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия

⁵ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁶ Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

Нейтронными и синхротронными методами была исследована метастабильная фаза промежуточно-валентного интерметаллида CeNi, синтезированного при высоком давлении. При помощи дифракционных методов изучалась кристаллическая структура, при помощи спектроскопии - валентное состояние ионов церия. Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на дифрактометрах ФДВР и ДН-12 (на реакторе ИБР-2), рентгеновские дифракционные измерения — на дифрактометрах Stoe IPDS II и STADI MP, станции СТМ (на синхротроне в НИЦ «КИ»). XANES и EXAFS спектроскопические данные были получены на станции СТМ. Была определена пространственная группа метастабильной фазы CeNi – Fd3m с позициями церия 8a и позициями никеля 8b, значение параметра решетки $a=6.4805 \text{ \AA}$ при $T=300\text{K}$. Измерена тепловое расширение данной фазы CeNi. Проведено сопоставление полученной структуры с результатами измерений локальной топологии окружения ионов церия и никеля на основе спектров EXAFS. На основе XANES спектров исследована температурная зависимость эффективной валентности ионов церия. Оказалось, что степень делокализации $4f$ электронов церия в фазе высокого давления CeNi значительно выше, чем в материнской орторомбической фазе CeNi с пространственной группой Cmc21, а температурная зависимость валентности слабее. Объемный коллапс в CeNi (22%) по масштабу величины превышает таковой для γ - α фазового перехода в церии (~15%), и является рекордным для промежуточно-валентных систем на основе церия. Близкий масштаб коллапса f -электронной оболочки наблюдается для δ - α' фазового перехода в плутонии (26%), гомологом δ -фазы которого является система CeNi. Обсуждается гомология валентно-нестабильных систем на основе церия и актинидов.

Магнитные структуры соединений $Tb(Mn_{1-x}Ni_x)_2Si_2$

А. Н. Пирогов^{1,2}, А. Е. Теплых¹, Е. Г. Герасимов¹, А. С. Волегов²

¹ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Институт естественных наук УФУ, Екатеринбург, Россия

Тройные интерметаллические соединения RM_2X_2 с $M = Ni, Mn$, $X = Ge$ или Si являются представителями класса естественных слоистых магнетиков, в которых обменное взаимодействие внутри слоя значительно выше, чем обмен между магнитными атомами находящимися в соседних слоях. Благодаря наличию спонтанных и индуцированных внешним полем магнитных фазовых переходов в этих соединениях они привлекают большой интерес исследователей.

Настоящая работа посвящена магнитным фазовым переходам и магнитным структурам в соединениях $Tb(Ni_{1-x}Mn_x)_2Si_2$ с $x = 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ и 1.0 . Температурные и полевые зависимости ас-восприимчивости и намагниченности были определены с помощью SQUID магнитометра на монокристаллических образцах в Институте естественных наук. Нейтронографические данные получены с помощью дифрактометров Д-2 и Д-3 Института физики металлов, реактор ИВВ-2М.

На кривых полевой зависимости намагниченности соединений $Tb(Ni_{1-x}Mn_x)_2Si_2$ имеют место скачки намагниченности при относительно небольших внешних полях, например, для образца с $x = 0.1$ величина намагниченности скачком изменяется в полях, при 3 и 5 Тл. Нейтронографические данные показывают, что магнитная структура этого образца является амплитудно-модулированной и описывается волновым вектором $k = (0.5+\mu, 0.5-\mu, 0) = 2\pi(0.585/a, 0.415/b, 0.0)$. Магнитные моменты ионов тербия ориентированы вдоль оси c и равны $8.1 \mu_B$ и $6.4 \mu_B$ для ионов в узлах $(0, 0, 0)$ и $(0.5, 0.5, 0.5)$, соответственно. В пределах экспериментальной погрешности ($\pm \mu_B$) можно считать, что атомы никеля и марганца немагнитны. Эти результаты позволяют считать, что амплитудно-модулированная структура трансформируется в ферромагнитную структуру под влиянием сравнительно небольшого внешнего поля. В интервале концентраций $x = 0.2 - 0.4$ происходит резкий рост параметра решетки c и величины объема элементарной ячейки. Это связано с магнитным переходом от амплитудно-модулированной структуры, сформированной магнитными моментами ионов тербия, к соизмеримой (и $k=0$) структуре спинов атомов марганца.

Обнаружено весьма необычное поведение магнитного упорядочения. Замещение немагнитного никеля магнитными атомами марганца сопровождается разрушением старого (при $x=0$) магнитного порядка и образованием нового порядка.

**Смена знака спиновой киральности в моногерманидах
переходных металлов**

*С. В. Григорьев^{1, 2}, S.-A. Siegfried³, Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, В. А. Дядькин^{1, 4},
Н. М. Чубова¹, Е. В. Москвин^{1, 2}, D. Menzel⁵, A. Heinemann³, C. Dewhurst⁶,
А. В. Цвященко⁷*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

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

⁵Technische Universitat Braunschweig, Braunschweig, Germany

⁶Institute Laue-Langevin, Grenoble, France

⁷Институт физики высокого давления, Троицк, Россия

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

Нейтроннография жидкого галлия

Н. М. Благовещенский, А. Г. Новиков, А. В. Пучков, В. В. Савостин

ГНЦ РФ – Физико-энергетический институт, Обнинск, Россия

Жидкий галлий – вещество, обладающее рядом необычных свойств. Обширный температурный диапазон существования жидкой фазы (303 – 2500 K) и низкое давление насыщенных паров при $T < 1400$ K делает галлий перспективным теплоносителем с выдающимися термогидравлическими свойствами. Недавно, например, галлий предложено использовать в качестве рабочего вещества самоохлаждающейся мишени фотон–нейтронного конвертора на пучке электронного ускорителя в проекте компактного экологически чистого источника для нейтрон-захватной терапии [1].

В данной работе проанализированы данные нейтронного эксперимента, проведенного на время-пролетном спектрометре ДИН-2ПИ (Реактор ИБР-2М, Дубна).

Из экспериментальных динамических структурных факторов жидкого галлия, полученных при температурах 313, 433, 553, 673 и 793 K, выделена квазиупругая составляющая, включая как когерентную, так и некогерентную компоненты. Для когерентного рассеяния был выполнен анализ спектров в области передач волнового вектора Q , прилежащей к главному максимуму структурного фактора $S(Q)$. При этом использовался подход, основанный на представлении для модифицированной модели жидкости твердых сфер. Спектры некогерентного квазиупругого рассеяния удалось описать с использованием модели простой диффузии. Результаты двух методов анализа, как по величине коэффициента самодиффузии, так и его температурной зависимости хорошо согласуются между собой и описываются Аррениусовским законом с постоянной энергией активации ~ 6.6 Кдж/моль. С ростом температуры наблюдается постепенное отклонение температурной зависимости коэффициента самодиффузии от формы $D(T)$, полученной из зарубежных данных по вязкости, что может объясняться начинающейся кластеризацией жидкого галлия, вызванной преобладающим ковалентным характером межатомных связей.

Проанализирована неупругая часть нейтронного рассеяния; было установлено наличие двух компонент в спектре элементарных возбуждений жидкого галлия при $T = 333$ K. Согласно факту о наличии конкуренции в жидком галлии между металлической и ковалентной связью, две ветви могут объясняться продольными колебаниями распространяющимися в плотностях, связанных с одиночной и удвоенной массой атома, как это было предложено в [2] для интерпретации двухветвевой структуры спектра возбуждений жидкого свинца.

1. Ю.А. Кураченко, Н.К. Вознесенский, А.А. Говердовский, В.И. Рачков. Медицинская физика, 2, 29 (2012).
2. Н.М.Благовещенский, В.А.Морозов, А.Г.Новиков, В.В.Савостин, А.Л.Шимкевич. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и Нейтронные исследования, 6, 10 (2006).

Структура магнетоферритина: синхротронные и нейтронные исследования

*М. В. Авдеев¹, В. И. Петренко^{1,2}, Л. Мельникова³, В. М. Гарамус⁴, Л. Алмаши⁵,
О. И. Иванов^{1,2}, Л. А. Булавин², З. Митрова³, П. Копчански³*

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

² *Киевский Национальный Университет ФФ, Киев, Украина*

³ *Институт экспериментальной физики, Словацкая академия наук, Кошице, Словакия*

⁴ *Исследовательский центр Геестахт, Геестахт, Германия*

⁵ *Исследовательский центр Вигнера, Венгерская академия наук, Будапешт, Венгрия*

В работе исследуется искусственный биологический комплекс – магнетоферритин, содержащий наночастицы оксида железа (здесь магнетит) внутри белковой оболочки апоферритина. С помощью малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (синхротронное излучение) и нейтронов анализируется структура комплекса, помещенного в водный раствор, в зависимости от фактора магнитной загрузки LF (loading factor), среднего числа атомов железа на один комплекс, в диапазоне от 0 до 1000. Анализируются также различия с ферритином (природным комплексом, где полость апоферритина заполнена специфической формой оксида железа). При увеличении LF кривые рассеяния обнаруживают ряд изменений, включая относительное увеличение интегрального рассеяния, а также сглаживание и сдвиг характеристических минимумов рассеяния на апоферритине. Применение вариации контраста в экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов дает существенный сдвиг точек компенсации исследуемых растворов в сторону большего содержания тяжелой воды по сравнению с расчетными значениями. Полученные экспериментальные данные указывают на увеличение полидисперсности комплексов, которая, по-видимому, связана с частичным разрушением белковой оболочки уже при достаточно малых магнитных загрузках ($LF > 200$). Можно также заключить, что при больших магнитных загрузках комплексы агрегируют. При $LF > 900$ растворы становятся нестабильными и осаждаются в течение нескольких часов. В то же время, надосадочный раствор обнаруживает присутствие апоферритина, что позволяет уточнить степень магнитной загрузки и распределение фактора загрузки по комплексам в начальном растворе.

Мезоструктура и фрактальные свойства новых прозрачных стекол на основе диоксида циркония

Г. П. Копица¹, Н. Н. Губанова¹, К. В. Ездакова¹, А. Е. Баранчиков²,
В. К. Иванов², А. Feoktistov³, V. Pipich³, B. Angelov⁴

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия

³ For Jülich Centre for Neutron Science JCNS, Garching, Germany

⁴ Institute of Macromolecular Compounds, Prague, Czech Republic

Прозрачные стёкла на основе аморфного ZrO_2 считаются крайне перспективными материалами для создания фотохромных устройств, каталитических систем, химических сенсоров. Так же, эти материалы можно использовать в качестве матрицы для термостойких люминесцентных нанокompозитов и нелинейных оптических устройств, лазеров.

В данной работе были впервые синтезированы прозрачные пористые стекла на основе диоксида циркония, не содержащие стеклующего компонента - диоксида кремния. Методами МУРН и УМУРН, МУРР, низкотемпературной адсорбции азота, РФА, РЭМ, а также ТГА были исследованы структура и физико-химические свойства стекол на основе ZrO_2 , синтезированных с помощью золь-гель метода из органических растворов пропилата циркония (IV), с использованием в качестве одного из гидролизующих компонентов: азотной (HNO_3)[1] и ледяной уксусной (CH_3COOH) кислот.

Комплексный анализ полученных данных показал, что:

1. Все образцы являются рентгеноаморфными и характеризуются высокой удельной поверхностью до $250 \text{ м}^2/\text{г}$.
2. Стекла, полученные с использованием HNO_3 , представляют собой системы с трехуровневой иерархической организацией структуры. 1-й структурный уровень составляют первичные частицы ZrO_2 с размерами $d_1 \approx 1 \text{ нм}$, из которых – на 2-м уровне – формируются фрактальные кластеры с размерами $d_2 \approx 24 \div 52 \text{ нм}$. На 3-м уровне образуются крупномасштабные ($d_3 \approx 2 \text{ мкм}$) агрегаты, обладающие «диффузной» поверхностью.
3. Использование в качестве гидролизующего компонента CH_3COOH , приводит к формированию стекол с двухуровневой иерархической организацией структуры. 1-й структурный уровень составляют первичные частицы ZrO_2 с размерами $d_1 \approx 1 \text{ нм}$, структурированные по типу ближнего порядка, из которых – на 2-м уровне – образуются крупномасштабные агрегаты с «диффузной» поверхностью.
4. Как температура синтеза, так и концентрация H_2O в исходном растворе оказывают существенное влияние на структурные характеристики стекол.

1. Н.Н. Губанова, Г.П. Копица, К.В. Ездакова и др. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2014, № 10, с. 1- 10.

Исследование методом МУРН магнитных эластомеров синтезированных в поперечном и продольном магнитном поле

М. А. Балашою^{1, 2}, В. Т. Лебедев³, И. Бика⁴, С. С. Абрамчук⁵, Ю. Л. Райхер⁶

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Национальный институт ядерной физики и инженерии, Бухарест, Румыния

³ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

⁴ Западный университет Тимишоара, Тимишоара, Румыния

⁵ Центр перспективных технологий, Москва, Россия

⁶ Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия

Синтез и исследование структуры и физических свойств магнитных эластомеров одно из направлений активно развивающихся технологий создания новых «умных» наноматериалов с молекулярной анизотропии и ферромагнитными наночастицами. Последние годы малоугловое рассеяние нейтронов и рентгеновского излучения активно используется для изучения внутренней структуры таких композитов [1,2].

В данной работе представлены результаты исследования магнитных эластомеров синтезированных в поперечном и продольном магнитном поле методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Измерения проводились на дифрактометре “Мембрана-2” (ПИЯФ РАН) на исходном эластомере P1(B1) без ферромагнитных включений (матрица) и на эластомерах P12-P32, P13-P33, P14-P34 и B2-B4 с феррочастицами в разных концентрациях и полимеризованных, без и в магнитном поле разной величины.

Опыты ставились в двух геометриях: образцы – пленки прямоугольной формы ориентировали одной из сторон вдоль, либо поперек вектора рассеяния.

1. Balasoiu M., Bica .I, Raikher Yu. L., Dokukin E. B., Almasy L., Vatzulik B., Kuklin, A. I. Optoelectron. Adv. Mater. – RC 5(5) 523 (2011).

2. Balasoiu M., Lebedev V. T., Orlova D. N., Bica I., Crystallogr. Rep. 56(7) 1177 (2011).

**Особенности строения многослойных полярных жидких кристаллов
и возможности их исследования с помощью резонансного
и нерезонансного рентгеновского рассеяния**

П. В. Долганов

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

В последние годы было установлено, что в полярных смектических жидких кристаллах существует многообразие структур с многослойным упорядочением [1-3]. Эти структуры можно характеризовать двухкомпонентным параметром порядка, модуль которого соответствует углу наклона молекул в слоях, а фаза – азимутальной ориентации молекул. Теория Ландау фазовых переходов, модель Изинга, экспериментальные результаты [4] указывают на возможность изменения от слоя к слою и фазы, и модуля параметра порядка. Природа образования полярных структур с изменением фазы или фазы и модуля параметра порядка различна. Установление структуры полярных фаз принципиально важно для физики жидких кристаллов.

В настоящей работе с использованием теории Ландау фазовых переходов [5,6] проведен расчёт структур полярных смектических фаз. Расчёты показывают, что имеются полярные структуры, образованные пространственным изменением фазы, и структуры с пространственным изменением фазы и модуля параметра порядка [5,6]. Обсуждается влияние межслоевых взаимодействий на образование различных полярных фаз.

Изменение от слоя к слою угла наклона молекул приводит к изменению толщины слоя, которое можно зарегистрировать с помощью нерезонансного рентгеновского рассеяния. Пространственное изменение фазы параметра порядка может быть обнаружено с помощью резонансного рассеяния [7-9]. Обсуждаются эксперименты, которые позволят определить особенности полярных смектических структур и прояснить природу образования многослойных смектических фаз.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ в рамках проектов 12-02-33124 и 14-02-00130.

1. S. Wang, L. Pan, et al., Phys. Rev. Lett. 104, 027801 (2010) ; L. Pan, P. Barois, et al., ibid. 108, 037801 (2012).
2. A.D.L. Chandani, A. Fukuda, et al., Liq. Cryst. 38, 663 (2011).
3. Y. Takanishi, I. Nishiyama, et al., Phys. Rev. E 87, 050503 (2013).
4. P. Fernandes, P. Barois, et al., Eur. Phys. J. E 20, 81 (2006).
5. P. V. Dolganov, V.M. Zhilin, et al., Phys. Rev. E 82, 040701(R) (2010).
6. П.В. Долганов, Письма в ЖЭТФ 100, 64 (2014).
7. V.E. Dmitrienko, Acta Cryst. A39, 29 (1983).
8. P. Mach, R. Pindak, et al., Phys. Rev. Lett. 81, 1015 (1998).
9. M.A. Osipov and M.V. Gorkunov, Liq. Cryst. 33, 1133 (2006).

Серийная кристаллография макромолекул на синхротронном излучении

А. Н. Попов

Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

Использование рентгеноструктурного анализа биологических макромолекул ограничено доступностью достаточно размерных кристаллов и быстрым их разрушением во время сбора данных вследствие радиационных эффектов. Получение сравнительно больших кристаллов макромолекул (более 10-20 мкм) приемлемого дифракционного качества часто затруднительно и затратно. Для проведения рентгеновских измерений с использованием более доступных кристаллов микронных размеров, сегодня на основе синхротронного излучения развиваются методы серийной кристаллографии. Суть метода заключается в измерении частичных наборов данных, используя большое количества мелких кристаллов, с последующим шкалированием и объединением этих данных для получения полного набора. Развитие этой новой техники базируется на безшумовых двумерных пиксельных детекторах рентгеновского излучения, возможности получать высокопоточные, коллимированные до микронных размеров пучки рентгеновского излучения, на доступности высокоточных и скоростных дифрактометров комбинированных с роботами для автоматической установки кристаллов. В зависимости от качества и размеров конкретных кристаллов, измерения могут быть организованы различным образом. При кристаллах объемом 10^{-9} мм³ невозможно какое-либо планирование эксперимента основанное на предварительной оценки качества дифракции; из-за радиационных разрушений от одного кристалла возможно получить не более одной-двух дифракционных картин. В этом случае используется слепое двумерное сканирование объема пространства, где предположительно находятся кристаллы. При больших размерах кристаллов с объемом около 10^{-8} мм³ используется автоматический предварительный поиск кристаллов. Последующий сбор данных организуется используя результаты предварительного анализа качества дифракции и учитывая эффекты радиационных разрушений. В представляемом докладе будут обсуждаться основные проблемы метода и способы их решений.

Феномен фрактальной организации хроматина ядер эукариот

*В. В. Исаев-Иванов¹, Д. В. Лебедев¹, М. В. Филатов¹, А. Ю. Конев¹,
Р. А. Пантина¹, Н. В. Белякова¹, Е. Ю. Варфаломеева¹, И. А. Юнг¹,
Г. Н. Рычков¹, А. В. Илатовский¹, В. Питич³, А. В. Онуфриев²,*

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

² *Virginia Tech 2050 Torgersen Hall (0106), Blacksburg, Virginia, USA*

³ *Juelich Centre for Neutron Science, Garching, Germany*

Одна из моделей упаковки ДНК в хроматине интерфазных ядер клеток высших, которая дискутируется в последние годы, предполагает фрактальную организацию супернуклеосомной структуры двойной спирали [1].

В этой работе приведены экспериментальные данные полученные методом МУРН на целых ядрах клеток эритроцитов кур (Hen), HeLa, глиомы (C6) и эмбрионов дрозофилы (DE), в которых хроматин фиксирован глутаровым альдегидом. Диапазон рассеянных векторов, в котором получены кривые рассеяния, составил $Q = 0.00029 - 0.25 \text{ \AA}^{-1}$, что соответствует диапазону линейных размеров рассеивателя $l = 2.5 \text{ нм} - 2.17 \text{ мкм}$. Измерения кривых рассеяния проводилось при двух значениях содержания D₂O в H₂O - 99% и 40%. Кривые рассеяния, полученные при 40% D₂O, характеризуют структуру нуклеиновой компоненты хроматина (DNA+RNA). Для всех исследуемых ядер форма этих кривых имеет общую качественную черту: кривые, в координатах log-log, имеют два линейных участка и точку их кроссовера. Количественно наклон линейных участков кривых рассеяния справа от точки кроссовера (большие углы) составляет: Hen $D_{\text{Hen}} = -2.2$, HeLa $D_{\text{HeLa}} = -2.25$, C6 $D_{\text{C6}} = -2.15$ и DE $D_{\text{DE}} = -2.05$ и слева от точки кроссовера соответственно: Hen $D_{\text{Hen}} = -3.4$, HeLa $D_{\text{HeLa}} = -3.96$, C6 $D_{\text{C6}} = -2.8$ и DE $D_{\text{DE}} = -3.3$. Точки кроссовера линейных участков: Hen $Q_{\text{Hen}} = 0.002 \text{ \AA}^{-1}$ (315nm), HeLa $Q_{\text{HeLa}} = 0.004 \text{ \AA}^{-1}$ (155nm), C6 $Q_{\text{C6}} = 0.009 \text{ \AA}^{-1}$ (70nm) и DE $Q_{\text{DE}} = 0.012 \text{ \AA}^{-1}$ (52nm). Феноменологически из этого следует, что во всех исследуемых ядрах структура нуклеиновой компоненты хроматина, описываемая линейным участком кривой справа от точки кроссовера, обладает свойствами масс-фрактала (близкими к Гауссовому клубку), а структура слева от точки кроссовера обладает свойствами поверхностного фрактала (за исключением ядер C6)

Методом конфокальной микроскопии, было показано, что распределение центров репликации в клетках HeLa, фибробластов, карциномы, глиомы имеет фрактальные свойства, которые коррелируют с данными измерения МУРН.

1. Jonathan D Halverson, Jan Smrek, Kurt Kremer and Alexander Y Grosberg, Rep. Prog. Phys. 77 (2014) 022601 (24 pp).

Структура и динамика комплексов белков RecA и RecX

*Д. В. Лебедев¹, А. В. Швецов^{1, 2}, Д. Б. Червякова^{1, 3}, Д. В. Карелов¹,
А. Радулеску⁴, О. Иванова⁴, П. Фалуш⁵, Д. М. Байтин^{1, 2}, В. В. Исаев-Иванов¹*

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

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

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

⁴ *Jülich Center for Neutron Science outstation at MLZ, München, Germany*

⁵ *Institute Laue-Langevin, Grenoble, France*

RecA-подобные белки играют ключевую роль в таких важных процессах как репарация двунитевых разрывов ДНК и перемешивание генетического материала в процессе мейоза у высших. Несмотря на накопленный за несколько десятилетий активного изучения огромный объем информации о структуре и функциях этих белков, молекулярные механизмы их действия до сих пор не могут считаться установленными.

Для изучения конформационных изменений белков RecA в нативных условиях нами были построены полноатомные модели их функциональных форм - филаментов, в частности белкового самополимера, пресинаптического комплекса с одонитевой ДНК и АТФ, а также комплекса одного из белков-регуляторов гомологической рекомбинации в бактериях, RecX, с пресинаптическим филаментом. Полученные модели имеют существенные отличия от имевшихся ранее структурных данных, основанных на рентгеновской кристаллографии и криоэлектронной микроскопии, позволяют оценить роль различных внутри- и межмолекулярных взаимодействий, а также содержат информацию о конформационной подвижности макромолекулярных комплексов на временах до нескольких десятков наносекунд. Проведенные измерения структуры соответствующих комплексов методом МУРН находились в хорошем соответствии с результатами молекулярного моделирования. Сравнительные измерения динамики филаментов методом НСЭ показали значительное уменьшение подвижности филаментов белка RecA после формирования пресинаптического комплекса, что хорошо соответствовало модельным расчетам, а также некоторое увеличение подвижности филамента после связывания белка-регулятора RecX, что может указывать на дестабилизирующее влияние этого белка на пресинаптический комплекс, также предсказанное по результатам моделирования.

Advances in Neutron Scattering from Biomembranes

N. Kučerka^{1, 2}

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

² *University Bratislava, Faculty of Pharmacy Comenius, Bratislava, Slovakia*

Biological membrane mimetics, such as liposomes, lipid bilayers and model membranes, are used in a broad range of scientific and technological applications due to the unique physical properties of these amphiphilic aggregates. They serve as platforms for studying the soft matter physics of membranes and membrane dynamics, interactions of bilayers with drugs or DNA, and effects of various additives or environmental changes. The modern state-of-the-art research takes advantage of joining brilliance of X-ray scattering sources with some peculiar properties of neutrons, and combines results with the power of computer simulations. The advances in chemistry, and deuteration possibilities in particular, allow for better experimental spatial resolution and possibility to pin-point labels within membranes. It is only a matter of time for various technological applications to follow these advances and utilize the amphiphiles in e.g., liposome-based nanoparticles for drug delivery, formulation of liposomes for prolonged *in vivo* circulation and functionalization for medical purposes, novel drug delivery systems for increased drug loading, and the use of tethered membranes for bio-sensing applications. The use of liposomes in textile dyeing, and a role of lipidic nanoparticles in the food industry is already happening future.

Рентгеноструктурный анализ с использованием синхротронного излучения как основа рационального дизайна белка гликолипидного транспорта

*В. Р. Самыгина¹, Б. Очоа-Лизарралде², А. Н. Попов³, С. Делгадо², Х. Жай⁴,
А. Кабо-Бильбао², Х. Пайк⁴, Ю. Г. Молотковский⁵, Д. Патель⁶,
Р. Браун⁴, Л. Малинина²*

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

² *SICbioGUNE, Дерио, Испания*

³ *Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция*

⁴ *Университет Миннесоты, Остин, США*

⁵ *Институт биоорганической химии РАН, Москва, Россия*

⁶ *Memorial-Sloan-Kettering Center, Нью-Йорк, США*

Информация о трехмерной структуре белков лежит в основе фундаментальных знаний о функционировании макромолекул и современных биотехнологий. Рентгеноструктурный анализ является самым широко используемым методом для определения трехмерной структуры. Поскольку детальность и точность кристаллической структуры зависят от пространственного разрешения дифракционных данных, использование синхротронного излучения актуально для применения метода. Знание деталей строения белка и в особенности его активного центра позволяет создавать белки с заданными свойствами.

Рентгеноструктурный анализ был использован для рационального дизайна мутантов белка гликолипидного транспорта человека. Белок гликолипидного транспорта человека неспецифично осуществляет невизукулярный транспорт сфинголипидов которые играют важную роль в регулировании роста клеток, внутриклеточном трафике, старении и пр. [1]. Механизм функционирования белка до конца не ясен. Анализ структур в комбинации с биофизическими методами позволил сконструировать мутант D48V специфичный только к одному типу гликосфинголипидов – сульфатидам [2] изменивший свою селективность за счет изменения внутридимерных контактов [2,3]. Также были выбраны новые мишени точечных мутаций (аспарагин 52) позволяющие создать мутанты с более тонким регулированием селективности белка гликолипидного транспорта. Полученные в работе структуры новых мутантов в комплексе с различными липидами позволили объяснить изменение селективности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 14-04-01671).

1. L. Malinina, M. Malakhova, et al., Nature 430, 1048 (2004).

2. V.R. Samygina, A.N. Popov, A. Cabo-Bilbao, et al., Structure 19, 1644 (2011).

3. V.R. Samygina, B. Ochoa-Lizarralde, A.N. Popov, Acta Cryst D69, 603 (2013).

Квантование волн спиновой плотности в сверхтонких пленках Cr

Е. А. Кравцов¹, Д. В. Благодатков¹, Л. Паолазини², В. В. Устинов¹, Х. Цабель³

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция*

³ *Рур-университет, Бохум, Германия*

Магнитная структура хрома, характеризующаяся наличием несоизмеримой волны спиновой плотности при низких температурах, привлекает к себе внимание исследователей уже более 40 лет. Волна спиновой плотности представляет собой периодическую модуляцию величины магнитного момента атомов хрома в направлении распространения волны. Период волны спиновой плотности в объёмном хrome составляет от 5 до 7 нм и несоизмерим с периодом кристаллической решётки хрома. Волна спиновой плотности в хrome сосуществует с двумя другими типами волн: волной зарядовой плотности и волной упругих напряжений. Эти волны представляют собой модуляцию электронной плотности и межатомного расстояния, соответственно.

В последнее время наблюдается интереса к многослойным наноструктурам и тонкопленочным системам на основе хрома, которые рассматриваются как модельные системы для исследования магнитных фазовых переходов. Например, системы на основе хрома играют важную роль в формировании эффекта гигантского магнетосопротивления в свехрешетках Fe/Cr, а размерные эффекты, возникающие в тонких пленках хрома, приводят к изменению транспортных свойств, что может быть связано с квантовым фазовым переходом.

В настоящем докладе мы представляем результаты исследования волн спиновой плотности в сверхтонких пленках хрома, выращенных на диэлектрических подложках MgO. Установлено, что при толщинах пленок Cr менее 20 нм происходит резкое качественное изменение характера температурных зависимостей периода волны спиновой плотности: период волны спиновой плотности изменяется с температурой на дискретную величину, причем в зависимости от ориентации магнитного поля (в плоскости образца либо перпендикулярно плоскости образца) с повышением температуры наблюдается, либо увеличение, либо уменьшение периода волны спиновой плотности. Мы связываем наблюдаемые аномалии с возможным проявлением квантового фазового перехода, возникающего в случае, когда толщина пленки Cr становится сравнима с периодом волны спиновой плотности.

Эффект нейтронного гетеродинамирования и быстрая кинетика нано-систем

Б. П. Топерверг

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Бурное развитие исследований быстрой кинетики и динамики магнитных нано-систем, наблюдаемое в последнее время, в основном обусловлено насущной необходимостью более глубокого понимания фундаментальных процессов формирования и распространения сигнала в нано-средах и поиском путей повышения операционного быстродействия ключевых устройств нано-электроники.

При этом, временной отклик на внешнее воздействие (магнитное поле, спиновую инжекцию и т.п.) в экспериментах типа "pump and probe" обычно регистрируется с помощью магнитооптических измерений в видимой или рентгеновской областях спектра. Вместе с тем принято считать, что, несмотря на известные преимущества нейтронов в исследованиях магнитной динамики, они мало приспособлены для изучения быстрой магнитной кинетики в нано-структурированных средах, как в силу низкой светосильности нейтронных источников, так и в связи с малой скоростью нейтронов.

Тем не менее, первое обстоятельство может быть частично компенсировано за счет измерений при малых углах скольжения к нано-структурированным поверхностям. Второе обстоятельство не является существенным препятствием, если учесть, что скорость нейтрона соизмерима со скоростью, например, доменных стенок, осуществляющих распространение информации в магнитных средах. Таким образом, единственной принципиальной проблемой является быстрота регистрации нейтронного отклика на высокочастотную модуляцию рассеивающей способности образца[1]. Эта проблема может быть решена с помощью радиочастотной модуляции нейтронного пучка, падающего на магнитную гетероструктуру, помещенную в радиочастотное поле близкой частоты. В результате смешения двух высокочастотных модуляций возникает эффект гетеродинамирования, позволяющий регистрировать на детекторе низкочастотный сигнал. В частности, оказывается возможным понизить частоту вариации измеряемого сигнала вплоть до 1 Гц при частоте модуляции падающего пучка и переменного поля на образце порядка 1 МГц.

Обсуждаются также возможные применения эффекта нейтронного гетеродинамирования в спин-эхо спектроскопии, 3D рефлектометрии и т.д.

1. K. Zhernenkov, D. Gorkov, B.P. Toperverg, H. Zabel, Phys. Rev. B. 020401(R) (2013).

Селективное по глубине исследование переориентации магнитных моментов Fe в антиферромагнитной структуре [Fe/Cr]_n под действием внешнего поля методом ядерно-резонансной рефлектометрии на синхротроне Spring8

M. A. Андреева¹, A. Gupta², G. Sharma², S. Kamali³, K. Okada⁴, Y. Yoda⁴

¹ *Московский государственный университет ФФ, Москва, Россия*

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

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

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

Исследования магнитного упорядочения в многослойных пленках с нанометровым разрешением по глубине чрезвычайно важны для работы различных устройств спинтроники. Ядерно-резонансная рефлектометрия имеет существенные преимущества перед рефлектометрией поляризованных нейтронов, так как в этих экспериментах измеряются не только угловые рефлектометрические кривые, но также и спектры отражения при разных углах скольжения.

В данной работе на станции BL09 синхротрона SPring-8 исследовался образец [⁵⁷Fe (3.0 нм)/Cr (1.2 нм)]₁₀ с антиферромагнитным межслойным упорядочением. Для подобных образцов наблюдалось нетривиальная «ступенчатая» форма кривой намагниченности [1], что объяснялось последовательным перемагничиванием отдельных слоев. Теоретическому рассмотрению этого процесса посвящен ряд работ [2-4]. Наши измерения проводились при последовательном увеличении внешнего поля H вдоль пучка СИ и перпендикулярно к нему. Для расшифровки распределения намагниченности по глубине требовалось фиттировать все полученные временные (спектральные) и угловые зависимости одновременно для каждого значения приложенного поля в двух геометриях. Вычисления проводились с помощью пакета программ REFTIM [5-6].

Полученная картина не соответствует выдвинутым теоретическим предположениям, что трансформация магнитной структуры начинается с поверхностных слоев [2-3]. Модель перемагничивания, предложенная в [4], оказывается более реалистичной. Наши результаты свидетельствуют, что даже для очень маленьких полей трансформация затрагивает всю структуру сразу и намагниченность в структуре испытывает последовательные волнообразные изменения.

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-02-00924-а и № 13-02-00760-а.

1. V. V. Ustinov, M. A. Milayev, L. N. Romashev, et al., J. Mag. Mag. Mater. 300, e281 (2006).
2. J. Meersschant, C. L'Abbé, F. M. Almeida et al., Phys. Rev. B 73, 144428-1-7 (2006).
3. A. I. Morosov, A. S. Sigov, Uspekhi Fizicheskikh Nauk 180 (7), 709 (2010).
4. www.imp.uran.ru/UserFiles/File/dostizhenia/Ustinov.pdf.
5. M. A. Andreeva, Hyperfine Interactions 185, 17 (2008).
6. <http://www.esrf.fr/computing/scientific/REFTIM/main.htm>

Каналирование нейтронов в слоистых волноводах

С. В. Кожевников¹, В. К. Игнатович¹, Т. Келлер², Ф. Отт^{3, 4}, Ф. Раду⁵,
Ю. Н. Хайдуков²

¹ Joint Institute for Nuclear Research FLNP, Dubna, Russia

² Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Germany

³ CEA, IRAMIS, Laboratoire Léon Brillouin, Gif sur Yvette, France

⁴ CNRS, IRAMIS, Laboratoire Léon Brillouin Gif sur Yvette, France

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

В оптике проникающих излучений актуальным направлением является уменьшение размеров зонда, который используется для исследования локальных микроструктур. Одним из перспективных методов получения нейтронных пучков субмикронной ширины являются слоистые волноводы. В работе [1] продемонстрирован неполяризованный микропучок нейтронов, а в работе [2] - поляризованный. Комбинация рефлектометра поляризованных нейтронов и немагнитного волновода [3] использована для исследования аморфной магнитной проволоочки [4].

В процессе распространения (каналирования) нейтронной волны вдоль слоёв волновода плотность нейтронов экспоненциально затухает на расстоянии x_c , которое называется длиной каналирования. В работах [5,6] длина каналирования была определена экспериментально, но детального изучения зависимости x_c от параметров волновода ещё не проводилось. В нашей работе представлены результаты экспериментального исследования длины каналирования в зависимости от толщины верхнего туннелирующего слоя и глубины ямы оптического потенциала волноводной структуры. Показано, что длина каналирования увеличивается при увеличении толщины верхнего слоя и глубины потенциальной ямы.

Результаты данного исследования важны с фундаментальной и прикладной точек зрения. Они помогут более глубокому пониманию явления каналирования нейтронной волны в слоистой структуре. С другой стороны, полученные результаты могут быть использованы при оптимизации слоистых волноводов для получения максимальной интенсивности нейтронного микропучка, что послужит развитию метода зондовой нейтронной микроскопии.

1. F. Pfeiffer, et al., Phys. Rev. Lett. 88, 055507 (2002).
2. S.V. Kozhevnikov, et al., Physica B 406, 2463 (2011).
3. S.V. Kozhevnikov, et al., Crystallography Reports 56, 1207 (2011).
4. С.В. Кожевников и др., Физика твёрдого тела 56, 63 (2014).
5. S.V. Kozhevnikov, et al., ЖЭТФ 144, 733 (2013).
6. Ю.В. Никитенко и др., Поверхность 10, 1 (2014).

Новый вариант полного поляризационного анализа для нейтронной рефлектометрии по времени пролета

В. Г. Сыромятников^{1,2}, Чжоу Зо Линь¹

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

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

В работе представлен новый вариант полного поляризационного анализа для нейтронной рефлектометрии по времени пролета с использованием магнитных многослойных наноструктур. Приведено сравнение с традиционными способами нейтронного поляризационного анализа.

Особенности нейтронной оптики вблизи брэгговского отражения

В. В. Воронин^{1, 2}

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

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

Рассматриваются особенности нейтронной оптики совершенного кристалла вблизи брэгговского отражения. При этом в кристалле происходит значительная перестройка волновой функции нейтрона [1], что приводит к целому ряду новых нейтронооптических явлений:

1. В случае нецентросимметричного кристалла может наблюдаться эффект вращения спина нейтрона за счет швингеровского взаимодействия с электрическим полем кристалла. При чем, величина этого поля достигает 10^8 В/см для кристалла кварца. Данное явление планируется использовать в эксперименте по поиску электрического дипольного момента нейтрона [2].

2. Вблизи выполнения брэгговского условия возникает эффект аномальной временной дисперсии. При чем дисперсия дифрагирующего нейтрона при таких условиях может на 3 - 4 порядка превосходить аналогичную величину для свободного нейтрона, что открывает новые возможности в прецизионной нейтронной спектроскопии [3].

3. Показатель преломления нейтрона при таких условиях ведет себя резонансным образом с шириной порядка брэгговской ширины отражения и изменение энергии падающего нейтрона на величину $\sim 10^{-5}$ приводит к значительному (десятки процентов) изменению потенциала взаимодействия нейтрона с кристаллом.

Работа поддержана РФФИ (грант № 12-02-00446-а).

1. Федоров В.В., Воронин В.В. Новые возможности поиска ЭДМ нейтрона поляризационным методом при дифракции в кристалле без центра симметрии. Физика атом. ядра и элементарных частиц (Материалы Юбилейной XXX Зимней школы ПИЯФ, ч.1), СПб, 1996, с.123-164.

2. V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, E. Lelièvre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, V.V. Voronin, Yu.P. Braginetz, Measurement of the neutron electric dipole moment via spin rotation in a non-centrosymmetric crystal, Physics Letters B 694 (2010) 22-25.

3. В.В.Воронин, Ю.В.Борисов, А.В.Иванюта, И.А.Кузнецов, С.Ю.Семенихин, В.В.Федоров, Аномальное поведение дисперсии нейтрона, проходящего через кристалл, при энергиях, близких к брэгговским, Письма в ЖЭТФ, 96 (10) (2012) 681-684.

Эксперимент по проверке электронейтральности нейтрона. Современное состояние

И. А. Кузнецов, В. В. Воронин

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Электронейтральность нейтрона общепризнанна, однако не является обязательным требованием Стандартной Модели. С другой стороны, некоторые варианты теорий с дополнительными измерениями дают возможность существования ненулевого электрического заряда нейтрона. В любом случае, увеличение точности экспериментального предела на заряд нейтрона представляется достаточно важным и интересным.

Наиболее точное измерение заряда нейтрона было проведено еще в 1988 г. по классической схеме отклонения траектории прохождения нейтрона в электрическом поле. В этом эксперименте было получено ограничение $q_n < 10^{-21} e$.

Предложен новый метод проверки электронейтральности нейтрона. Этот метод основан на использовании техники спиновой интерферометрии типа SESANS. В этих установках происходит пространственное расщепление нейтрона на два состояния с противоположными проекциями спина на магнитное поле. После прохождения рабочей области эти два состояния снова сводятся. Таким образом, фаза интерференционной картины, т.е. направление вектора поляризации в азимутальной плоскости определяется разностью фаз двух спиновых состояний, накопленной в рабочей области. Если такую систему поместить в однородное электрическое поле E , то данные два состояния, благодаря пространственному расщеплению, будут находиться под разными потенциалами. При наличии у нейтрона электрического заряда q_n это приведет к расщеплению состояний по энергии $\Delta E_e = q_n E \Delta z$ и, соответственно, даст дополнительный фазовый сдвиг $\Delta \phi_e = \Delta E_e \tau / \hbar$, где Δz – величина пространственного расщепления, τ – время нахождения нейтрона в электрическом поле. То есть подобная система оказывается чувствительной к электрическому заряду нейтрона. Чувствительность предложенного метода может составить порядка $10^{-22} e$, что на порядок превышает существующий предел.

Данная схема может быть дополнена дифракцией по Лауэ на совершенных кристаллах для усиления эффекта. Это даст возможность увеличить точность измерений еще на несколько порядков величины.

Был выполнен тестовый эксперимент по проверке возможности измерения фазового сдвига на установке SESANS. Результат полностью совпал с теоретическими расчетами.

1. I.A.Kuznetsov, V.V.Voronin, New approach to test a neutron electroneutrality by the spin interferometry technique, Proceedings of XX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, 2013, pp. 44-48.
2. V.V. Voronin, L.A. Akselrod, V.N. Zabenkin, I.A. Kuznetsov New approach to test a neutron electroneutrality by the spin interferometry technique Physics Procedia 42 (2013) 25-30.

**Исследование зависимости переноса поляризации
в неупорядоченной системе ядер ${}^8\text{Li}$ - ${}^6\text{Li}$
от внешнего магнитного поля**

*Ф. С. Джепаров, Ю. Г. Абов, А. Д. Гулько,
О. Н. Ермаков, Д. В. Львов, А. А. Любарев*

«Институт теоретической и экспериментальной физики» НИЦ КИ, Москва, Россия

Проведено изучение случайных блужданий в статически неупорядоченных средах на примере делокализации ядерной поляризации ансамбля бета-активных ядер ${}^8\text{Li}$, образованных в (n,γ) -реакции на тепловых поляризованных нейтронах в монокристаллах LiF. Процесс инициировался магнитными диполь-дипольными взаимодействиями и состоял в переносе поляризации с первично поляризованного ядра ${}^8\text{Li}$ на ближайшие (стабильные) ядра ${}^6\text{Li}$ и в дальнейшей миграции поляризации по ядрам ${}^6\text{Li}$ с возможным возвратом на ядра ${}^8\text{Li}$. Для получения информации о поляризации ядер ${}^8\text{Li}$ измерялась асимметрия их бета-излучения относительно внешнего магнитного поля H_0 . Процесс исследован вплоть до выхода на диффузионную асимптотику. Концентрация примеси ${}^6\text{Li}$ варьировалась от 3% до 10%, а поле H_0 изменялось от 200 Г до 1200 Г. Показано, что микроскопическая теория удовлетворительно согласуется с полученными экспериментальными результатами. Проведено сравнение с исследованиями математически родственного процесса фёрстеровского электродипольного переноса локализованных экситонов. Более подробная информация содержится в [1].

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

**Новые измерения ЭДМ нейтрона с двухкамерным спектрометром
ПИЯФ на реакторе ИЛЛ**

*А.Н. Пирожков¹, А.П. Серебров¹, Э.А. Коломенский¹, И.А. Краснощекова¹,
А.В. Васильев¹, А.О. Полюшкин¹, М.С. Ласаков¹, А.Н. Мурашкин¹,
В.А. Соловей¹, А.К. Фомин¹, И.В. Шока¹, О.М. Жеребцов¹, П. Гельтенборг²,
С.Н. Иванов², О. Циммер², Е.Б. Александров³, С.П. Дмитриев³, Н.А. Доватор³*

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

² *Institut Laue-Langevin, Гренобль, Франция*

³ *Физико-технический институт РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Существование электрического дипольного момента (ЭДМ) у элементарной частицы возможно только в случае одновременного нарушения инвариантности взаимодействий относительно дискретных преобразований симметрии - пространственной инверсии и обращения времени. В макромире косвенным свидетельством существования процессов, идущих с нарушением CP-четности, является наблюдаемая асимметрия материи и антиматерии. Стандартная Модель электрослабого взаимодействия дает основу для описания CP-нарушения, однако, не объясняет значительную наблюдаемую барионную асимметрию Вселенной. Трудности Стандартной Модели формально преодолеваются в других моделях, таких как суперсимметрия, модели со множественными хиггсовскими частицами и лево-правосимметричные теории, в которых CP-несохранение возникает в первом порядке по слабому взаимодействию. При этом ЭДМ нейтрона оказывается на уровне, доступном современному эксперименту. Экспериментальное измерение ЭДМ нейтрона обеспечивает одно из самых сильных ограничений на параметры теоретических моделей, описывающих нарушение инвариантности относительно обращения времени. В работе представлены результаты измерений ЭДМ нейтрона, выполненные на реакторе ИЛЛ на экспериментальной установке ПИЯФ. Использован двухкамерный магнитно-резонансный спектрометр с длительным удержанием ультрахолодных нейтронов. Полученные результаты на уровне достоверности 90% устанавливают верхний предел на величину ЭДМ нейтрона $|d_n| < 5.5 \cdot 10^{-26}$ е·см.

1. А.П. Серебров, Е.А. Коломенский, А.Н. Пирожков и др., Письма в ЖЭТФ 99, 7 (2014).

Дифрактометры на реакторе ПИК. Концепция

*А. И. Курбаков¹, А. М. Балагуров², И. В. Голосовский¹, И. А. Зобкало¹,
В. Б. Рыбаков³, Ю. П. Черненко¹, В. Т. Эм⁴*

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Московский государственный университет, Москва, Россия

⁴ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Представлена концепция по созданию дифрактометров на реакторе ПИК. Минимальный набор дифрактометров:

- суперпозиционный многосекционный порошковый дифрактометр (дифрактометр высокого разрешения на тепловых нейтронах);

- порошковый многодетекторный дифрактометр тепловых нейтронов (дифрактометр высокой светосилы)

- четырехкружный дифрактометр;

- многосчетчиковый порошковый дифрактометр холодных нейтронов (дифрактометр для исследований при высоких давлениях и измерений микрообразцов);

- дифрактометр поляризованных нейтронов с двухмерным детектором POLDI (совместно с ГЦГ, Германия);

- текстурный дифрактометр TEX (совместно с ГЦГ, Германия);

- стресс-дифрактометр ARES для измерения остаточных напряжений (совместно с ГЦГ, Германия),

которые должны быть введены в эксплуатацию к моменту запуска реактора ПИК на проектную мощность, продиктован двумя основными обстоятельствами:

1) перечнем приборов в проектах «Реконструкция лабораторного комплекса ПИК» и «Создание приборной базы реакторного комплекса ПИК», а также запланированного в этих проектах финансирования,

2) максимальным кругом задач, которые можно решать с помощью этих дифрактометров.

Приведены основные характеристики дифрактометров и места возможного размещения на пучках нейтронов в главном и нейтронном залах реактора ПИК.

Спектрометры на реакторе ПИК. Концепция

Е. С. Клементьев^{1, 2, 3}

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

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

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

Обсуждается приборный парк научно-исследовательского реакторного комплекса ПИК (НИРК ПИК), предназначенный для проведения экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов (НРН). В число НРН приборов должны войти трехосные и времяпролетные спектрометры, приборы с высоким энергетическим разрешением: спин - эхо спектрометры и установки обратного рассеяния.

Кратко рассматриваются основные области применения приборов НРН для исследования динамических свойств материалов в интересах физики конденсированного состояния, химии, биологии, нанотехнологии, наук о материалах. Нейтронная спектроскопия должна стать одним из приоритетных направлений работ на НИРК ПИК, как это уже произошло в ведущих мировых центрах нейтронных исследований. Обсуждается мировой опыт разработки, создания и эксплуатации нейтронных спектрометров основных типов, в частности, опыт Института Лауэ-Ланжевена с его высокопоточным реактором и развитым приборным парком НРН. Рассмотрен вопрос конкуренции со стороны быстро развивающихся нейтронных центров на основе импульсных источников нейтронов типа “spallation” с эффективными «сканерами возбуждений». Предложен состав первой очереди спектрометров для НИРК ПИК, включающий в себя наиболее востребованные российским и международным сообществом пользователей приборы, предназначенные для исследования структурных и магнитных возбуждений.

Приборный парк НИРК ПИК для НРН должен быть комплементарен приборным паркам импульсных источников нейтронов высокой интенсивности. Обсуждаются оптимальные параметры спектрометров НРН для ПИКа и наиболее выигрышные ниши их применения. Приборная база ПИКа должна давать возможность готовить специалистов, которые могут правильно планировать и проводить эксперименты на приборах разных типов, расположенных как на стационарных, так и на импульсных источниках нейтронов. По этой причине разнообразие принципов и конструктивных схем нейтронных спектрометров на ПИКе может являться его сильной стороной. После запуска в эксплуатацию приборов первой очереди НИРК ПИК, как ранее и в настоящее время ILL, будет лучшим в мире нейтронным центром на основе стационарного реактора для проведения экспериментов методом НРН. Представленная работа основана на результатах обсуждений рабочей группы по нейтронной спектроскопии на НИРК ПИК.

Рефлектометры на реакторе ПИК. Концепция

Н. К. Плешанов⁷, В. И. Боднарчук¹, А. А. Воробьев^{2,3}, К. Жерненков⁴,
А. И. Иоффе⁵, Е. А. Кравцов⁶, Б. П. Тонерверг⁷.

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

³ Uppsala University, Uppsala, Sweden

⁴ Commissariat à l'Energie Atomique, Institut Nanosciences et Cryogénie, Grenoble, France

⁵ Jülich Centre for Neutron Science, Garching, Germany

⁶ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

⁷ Lehrstuhl für Festkörperphysik/Experimentalphysik, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Germany

В рамках общей концепции нейтронной рефлектометрии как метода, позволяющего получать уникальную структурную информацию о нано-объектах и наносистемах, предлагается создание рефлектометрического комплекса на реакторе ПИК. Рефлектометрический комплекс из взаимодополняющих (двух базовых и двух специализированных) приборов обеспечит выбор адекватной измерительной схемы, необходимой области переданных импульсов, оптимального соотношения между разрешением и светосилой. Данные по зеркальному отражению нейтронов позволят определять зависимости от глубины атомной и магнитной плотности на масштабах $1 - 10^3$ нм; измерение незеркального рассеяния позволит исследовать латеральные структуры и корреляции на масштабах $10^2 - 10^5$ нм (в плоскости зеркального отражения); измерения малоуглового рассеяния и атомной дифракции при скользящем падении позволят разрешать особенности латеральных структур масштабов от атомного до 10^2 нм (в направлении, перпендикулярном плоскости зеркального отражения). Рефлектометрический комплекс необходим для решения фундаментальных и прикладных задач в развивающихся областях физики, химии и биологии, для исследования функциональных наноматериалов и разработки перспективных нанотехнологий.

**Установки малоуглового рассеяния нейтронов на реакторе ПИК.
Концепция**

Е. В. Москвин, С. В. Григорьев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) является одним из наиболее информативных методов изучения строения вещества на надатомных масштабах, поэтому исследования с применением МУРН охватывают чрезвычайно широкий класс объектов в биологии, медицине, химии, физике и многих других областях естествознания.

На строящемся в ПИЯФ реакторном комплексе ПИК планируется построить 11 малоугловых приборов из которых 6 установок малоуглового рассеяния и 5 рефлектометров.

Стремление к повышению эффективности малоугловых установок (улучшение разрешения, повышение светосилы, расширение диапазона измеряемых переданных импульсов, а также уменьшение стоимости установки) привело в последнее время к модификации стандартной схемы малоугловой установки, неизменной с 70-х годов прошлого столетия. [1]

В докладе рассматривается общая концепция малоугловых установок (их количество и типы), предлагаемых для строительства и размещения на реакторном комплексе ПИК.

1. W. Schmatz, T. Springer and J. Schelten. J.Appl.Cryst. 7, 96 (1974).

**Источники холодных нейтронов реактора ПИК:
перспективы создания и развития**

*В. А. Митюхляев, М. С. Онегин, Д. В. Тыц, М. В. Сажин, Д. Г. Маркушин,
В. Л. Соловей, А. Г. Фирсов, А. П. Булкин, В. А. Ульянов*

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Высокопоточный пучковый исследовательский реактор ПИК мощностью 100 МВт позволит получать плотность потока тепловых нейтронов в тяжеловодном отражателе более чем 10^{15} /см²с и рекордную, не имеющей аналогов в мире, – $5 \cdot 10^{15}$ /см²с в центральном экспериментальном канале.

Экспериментальные возможности реактора ПИК определяются не только высокой интенсивностью «тепловых» нейтронных пучков, которая приблизительно на порядок выше, чем на ныне действующих реакторах средней мощности, но также планируемым созданием источников горячих, холодных и ультрахолодных нейтронов, которые позволяют получать нейтронные пучки с нейтронами других энергий.

Практически все последние десятилетия наблюдается устойчивая тенденция роста использования холодных нейтронов с длиной волны более 4 Å в нейтронных экспериментах: в физике твердого тела, биологии, медицине, материаловедении, нано-индустрии, водородной энергетике, фундаментальной физике и др. Объясняется это тем, что нейтроны малой энергии обладают ярко выраженными волновыми свойствами и являются уникальным инструментом в различных областях фундаментальных и прикладных исследованиях.

На реакторе ПИК планируется создание трех источников холодных нейтронов для проведения нейтронных экспериментов на горизонтальных каналах ГЭК-3, ГЭК-2 и ГЭК-4-4'. В качестве замедлителя холодных нейтронов во всех трех источниках холодных нейтронов реактора ПИК предполагается использовать жидкий дейтерий при температуре 20 - 25 К, который является наиболее оптимальным замедлителем для реактора с тяжеловодным отражателем.

Приводятся сравнительные нейтронно-физические характеристики источников холодных нейтронов на реакторе в ILL и на реакторах ПИК и OPAL.

Создаваемые источники холодных нейтронов на реакторе ПИК в НИЦ КИ ПИЯФ являются научными приборами мирового класса, и их нейтронные характеристики позволят реактору ПИК быть одним из немногих в мире, обладающим значительными возможностями для использования холодных нейтронов в различных областях науки и техники. Три источника холодных нейтронов существенно расширят приборную экспериментальную базу реактора ПИК.

**Модуляционная дифракция – структурный анализ периодически
модулированного рассеяния**

Д. Ю. Чернышов

*Европейский центр синхротронного излучения,
Лаборатория “Швейцарско-Норвежские Линии”, Гренобль, Франция*

Периодическая модуляция структурных параметров на заданной частоте приводит к периодически меняющейся дифракционной интенсивности, которая может иметь довольно сложный частотный спектр. Частотный анализ дифракционного сигнала позволяет выделить вклады от средней структуры, ее периодически модулированной части, и интерференционный член. Будут представлены результаты численных расчетов и первых экспериментов по модуляционной дифракции, обсуждены достоинства и недостатки метода вместе с новыми возможностями порошковых и монокристалльных экспериментов на источниках синхротронного излучения.

**Ядерное резонансное рассеяние синхротронного излучения при энергиях
выше 30 кэВ. Развитие и применение метода**

И.А. Сергеев

Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany

Ядерное резонансное рассеяние синхротронного является важным методом для изучения электронных, магнитных и динамических свойств твердых тел. Одним из критичных требований для этого метода является высокоразрешающая монохроматизация рентгеновского излучения. Монохроматоры на отражениях высокого порядка кристаллов кремния [1] дают полосу пропускания порядка 1-5 мэВ и используются для исследования материалов содержащих Мессбауэровские изотопы с энергией перехода ниже 30 кэВ, например ^{57}Fe , ^{119}Sn , ^{151}Eu . Однако, этот метод не работает для высоких энергий, где требуются иные способы монохроматизации рентгеновского излучения.

В этом докладе представлены два новых подхода к расширению метода ядерного резонансного рассеяния на высокие энергии. В первом, комбинация монохроматора на отражениях низкого порядка на кристаллах кремния и распределенного детектора использована для изучения методом временной Мессбауэровской спектроскопии материалов содержащих изотопы с энергией перехода выше 50 кэВ [2]. В качестве примеров представлено изучение магнитных свойств никеля при давлениях до 250 ГПа [3], используя изотоп ^{61}Ni (67.4 кэВ), и изучение материалов, содержащих германий, используя изотоп ^{73}Ge (68.7 кэВ) [4].

В другом подходе, используемом для проведения экспериментов ядерного неупругого рассеяния, монохроматизация порядка 1 мэВ достигается с помощью дифракции обратного рассеяния на кристалле сапфира [1]. Такой монохроматор [5] был использован для изучения фононных спектров материалов, содержащих Мессбауэровские изотопы ^{125}Te , ^{121}Sb , ^{129}Xe с энергиями перехода 30-40 кэВ. В качестве примеров приведены исследование динамики решетки устройств фазовой памяти на базе пленок GeSbTe [6] и исследование свойств наполненного скуттерудита $\text{EuFe}_4\text{Sb}_{12}$, являющегося новым термоэлектрическим материалом.

1. Y. Shvyd'ko, X-ray optics. High-Energy-Resolution Applications. (Springer, Berlin, 2004).
2. I. Sergueev et al., Phys. Rev. Lett., 99, 097601 (2007).
3. I. Sergueev et al., Phys. Rev. Lett., 111, 157601 (2013).
4. R. E. Simon et al., Europhys. Lett., 104, 17006 (2013).
5. I. Sergueev et al., J. Synch. Rad., 18, 802 (2011).
6. T. Matsunaga et al., Adv. Funct. Mater., 21, 2232 (2011).

**Развитие в Сибирском центре синхротронного и терагерцового
излучения LIGA-методов изготовления глубоких микроструктур**

Б.Г. Гольденберг¹, А.Г. Лемзяков¹, А.Н. Генцелев¹, А.Г. Зелинский²,
В.И. Кондратьев¹, В.П. Назьмов¹, В.Ф. Пиндюрин¹

¹ *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия*

Одним из перспективных методов изготовления высокоаспектных микроструктур является LIGA-технология (сочетание методов рентгеновской литографии, гальванопластики и формовки). Использование синхротронного излучения, обладающего высокой проникающей способностью, при незначительной угловой расходимости позволяет создавать микроструктуры с недостижимыми другими методами параметрами (с гладкими, вертикальными стенками, глубиной от нескольких сотен микрон до миллиметра) для изготовления элементов новых приборов, таких как, например, микрофлюидные биочипы, элементы дифракционной оптики видимого, рентгеновского и ТГц – диапазонов и т. п.

В настоящее время в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ) развиваются различные методики производства рабочих рентгеношаблонов для глубокой рентгеновской литографии на станции "LIGA" источника СИ ВЭПП-3 и получения глубоких микроструктур в полимерных резистах [1, 2]. Активно разрабатывается метод микропучковой рентгенолитографии, основанный на прямом формировании требуемой топологии в толстом слое резиста диафрагмированным пучком СИ. Также, используется фотолитография по толстым (до 25 мкм) слоям резиста SU-8 для получения рабочих рентгеношаблонов. Разрабатывается двухстадийный метод с использованием промежуточных рентгеношаблонов и рентгенолитографии в «мягком» (5-10 Å) спектре СИ для получения структур с критическим размером 1-2 мкм. С использованием разработанных подходов получены тестовые микроструктуры из резистов SU-8 и ПММА с произвольно заданной топологией, в том числе образцы рентгеношаблонов с золотым покрытием.

1. Гольденберг Б.Г., Резникова Е.Ф., Лемзяков А.Г., Пиндюрин В.Ф. Микропучковый рентгенолитограф для прямого формирования глубоких LIGA-структур. *Автометрия*. 2013. Т. 49. № 1. С. 96-102.

2. Генцелев А.Н., Гольденберг Б.Г., Николенко А.Д., Пиндюрин В.Ф., Полетаев И.В. Установка для мягкой рентгеновской литографии на ВЭПП-4М. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2013. № 7. С. 96.

**Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов
в исследовании строения вещества: принципы, методы, алгоритмы**

В.В. Волков

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения и нейтронов широко используется для исследования надатомной структуры вещества при разрешении от долей нанометра до сотен нанометров. Этот диапазон соответствует размерам структурных деталей практически всех видов наносистем. Важнейшей особенностью малоуглового рассеяния является возможность анализа строения неупорядоченных систем и часто его применение – единственный способ получения информации о структуре образцов с хаотическим расположением неоднородностей плотности наноразмерного диапазона. Иногда особенно важным является тот факт, что с помощью малоуглового рассеяния можно изучать образцы в их естественном состоянии, без какой-либо специальной подготовки: жидкости, гели, полимерные системы, дисперсные порошки, биомолекулы в растворе и т. п.

Для полидисперсных систем наночастиц (в общем случае - неоднородностей) наиболее часто по данным рассеяния рассчитывают распределения по размерам при априори заданной форме (сферы, цилиндры, эллипсоиды и т. д.). Два основных подхода расчета взаимодополняют друг друга - поиск гладкой функции распределения методом регуляризации и моделирование суперпозицией аналитических функций распределения. Данные рассеяния от монодисперсных систем (наиболее характерный пример - растворы белковых молекул) позволяют относительно надежно определить так называемые инварианты - максимальный размер, радиус инерции, объем, площадь поверхности и функцию парных расстояний. После оценки инвариантов с помощью ряда программ определяют форму частиц с разрешением 1/3 - 1/5 от максимального размера (при учете дополнительной информации - и с более высоким разрешением).

Такие обратные задачи, как для полидисперсных, так и монодисперсных систем, математически плохо обусловлены, что требует как разработки устойчивых алгоритмов поиска решения, так и приобретения практического опыта. В докладе рассматриваются многие практические и теоретические аспекты интерпретации данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния.

E-mail: vvo@ns.crys.ras.ru, volkicras@mail.ru

Рентгеновская акустооптика: перспективы применения

Благов А.Е.¹, Писаревский Ю.В.¹, Ковальчук М.В.^{1,2}

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

Как хорошо известно, для электромагнитных волн рентгеновского диапазона кристаллы представляют собой объемную дифракционную решетку, и при выполнении условия Вульфа-Брэгга будет происходить дифракция рентгеновского пучка на кристаллической решетке. Это явление широко используется в рентгеновских исследованиях. Рентгеновская оптика, являющаяся ключевым компонентом любой рентгеновской или синхротронной экспериментальной установки, как правило, представляет собой совершенные кристаллы, которые применяются для формирования рентгеновского пучка (коллимации, монохроматизации и т.д.). Особенность применяемой в настоящее время рентгеновской оптики заключается в том, что она формирует статический рентгеновский пучок, а управление экспериментальными параметрами (такими как угол падения, длина волны) достигается посредством механической перестройки оптической системы - прецизионного поворота или перемещения образца или отдельных элементов рентгеновской оптики.

Акустическое воздействие на совершенные кристаллы в области низких ультразвуковых частот позволяет создавать условия регулярной деформации кристаллической решетки. Возникающие при этом дифракционные эффекты аналогичны механическому повороту или перемещению кристалла, что позволяет использовать рентгеноакустические воздействия для управления рентгеновским экспериментом [1]. При этом высокая частота ультразвука позволяет проводить эксперименты с разрешением по времени.

В докладе будут представлены экспериментальные методы акустического сверхбыстрого управления рентгеновским пучком: углом падения на образец, длиной волны. Будут представлены дифракционные методы диагностики упорядоченных материалов (в первую очередь кристаллов) с применением акустического управления рентгеновским экспериментом [2].

1. Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лидер В.В., Писаревский Ю.В. Исследование возможностей управления рентгеновским пучком с помощью кристалла, подвергнутого длинноволновым ультразвуковым колебаниям. ЖЭТФ, 128, вып. 5(11), 2005, с. 893-903.
2. Ковальчук М. В., Таргонский А.В., Благов А.Е., Занавескина И.С., Писаревский Ю.В. Новый метод измерения кривых дифракционного отражения в рентгеновской дифрактометрии с помощью ультразвуковой модуляции параметра решетки. Кристаллография, 56, вып. 5, 2011, с. 886.

**СЕССИЯ XI: ИСТОЧНИКИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ПРИБОРЫ И
МЕТОДИКА СИНХРОТРОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

**Эксперимент «Нейтрино-4» по поиску стерильных нейтрино
на реакторах СМ-3 и ПИК**

*А.П. Серебров¹, А.К. Фомин¹, В.Г. Зиновьев¹, В.Г. Ивочкин¹, Ю.Е. Логинов¹,
Г.А. Петров¹, В.А. Соловей¹, А.В. Чёрный¹, О.М. Жеребцов¹, Р.М. Самойлов¹,
В.П. Мартемьянов², В.Г. Циноев², В.Г. Тарасенков², В.И. Алёшин²,
А.Л. Петелин³, С.В. Павлов³, М.Н. Святкин³, А.Л. Ижутов³, С.А. Сазонтов³,
Д.К. Рязанов³, М.О. Громов³, В.В. Афанасьев³, В.И. Рыкалин⁴*

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

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

³ *Научно-исследовательский институт атомных реакторов, Димитровград, Россия*

⁴ *Институт физики высоких энергий, Протвино, Россия*

В настоящее время активно обсуждается возможность существования стерильного нейтрино, имеющего значительно меньшее сечение взаимодействия с веществом, чем, например, электронные антинейтрино от реактора. Предполагается, что благодаря переходу реакторных антинейтрино в стерильное состояние может наблюдаться эффект осцилляций на коротких расстояниях от реактора и дефицит потока реакторных антинейтрино на больших расстояниях. В нашем эксперименте "Нейтрино-4" на реакторах СМ-3 и ПИК ставится задача подтвердить или опровергнуть на определенном уровне точности возможность существования нового - стерильного нейтрино. К настоящему моменту проведены первые измерения зависимости $1/R^2$ антинейтринного потока на расстояниях 6-10 м от активной зоны реактора СМ-3 с прототипом детектора с объемом жидкого сцинтиллятора 400 литров. Готовится полномасштабная установка "Нейтрино-4" с объемом жидкого сцинтиллятора 3 м³. Обсуждаются первые результаты и увеличение чувствительности эксперимента.

1. А.П. Серебров, А.К. Фомин, В.Г. Зиновьев и др., Письма в ЖТФ 39, 25 (2013)

2. А.П. Серебров, А.К. Фомин, В.Г. Зиновьев и др., Письма в ЖТФ 40, 8 (2014)

Дифракционный предел теории многократного малоуглового рассеяния нейтронов на плотной системе рассеивателей

Д. В. Львов¹, Ф. С. Джепаров^{1, 2}

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики НИЦ КИ, Москва, Россия*

² *НИЯУ Московский инженерно-физический институт, Москва, Россия*

Метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) часто используется для изучения наномасштабных неоднородностей вещества. При большой концентрации неоднородностей существенный вклад в наблюдаемую интенсивность вносит интерференция нейтронных волн от разных рассеивателей. В теории однократного МУРН данное явление описывается с помощью структурного фактора. В то же время в теории многократного МУРН (ММУРН) обычно исходят из теории Мольер, которая верна только при малых концентрациях рассеивателей и интерференцию не учитывает. Впервые учет интерференции в ММУРН был проведен в работе [1] для монодисперсной системы рассеивателей. Однако структура теории [1] получилась сильно отличной от теории однократного МУРН, а конечные выражения для интенсивности ММУРН слишком сложными для аналитического анализа, требующими проведения численных расчетов.

В данной работе для частного случая, когда рассеяние нейтрона на одной неоднородности можно рассматривать в приближении дифракции, применен новый подход построения теории ММУРН. Предложено новое единое описание случаев однократного и многократного малоуглового рассеяния. На основе формализма чисел заполнения и метода концентрационного разложения построена теория однократного и многократного малоуглового рассеяния. Предложен новый подход к анализу многократного малоуглового рассеяния нейтронов (ММУРН) на основе синтеза теории однократного рассеяния и теории Мольер. Продемонстрирована взаимосвязь этого подхода с имеющейся теорией ММУРН [1], основанной на применении эйконального приближения. Показано, что наличие корреляций приводит к росту числа нерассеянных нейтронов, что объясняет эффект сужения спектров ММУРН [2], наблюдавшийся экспериментально и в численном моделировании.

1. Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов, Письма в ЖЭТФ 72, 518 (2000).

2. Ю.Г. Абов, Ф.С. Джепаров, Н.О. Елютин, Д.В. Львов, А.Н. Тюлюсов, ЖЭТФ 143, 507 (2013)

Влияние многократного малоуглового рассеяния нейтронов на максимальную глубину измерения напряжений в ферритной стали

В. Т. Эм¹, W. Woo², E. Shin², P. Mikula³, V. Ryukhtin³

¹ НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

² Korea Atomic Energy Research Institute, Daejeon, Republic of Korea

³ Nuclear Physics Institute ASCR, Rez, Czech Republic

Ранее [1] нами был предложен метод увеличения глубины проникновения нейтронов в сталях для измерения напряжений. Метод основан на использовании нейтронов с длинами волн, соответствующих минимумам полного сечения нейтронов вблизи Брэгговских скачков. Было показано, что используя нейтроны с длиной волны 2.39Å и отражение 110 для ферритной стали можно существенно увеличить максимальную длину проникновения (85 мм). В экспериментах с ферритной сталью было обнаружено уширение дифракционных пиков с длиной пути нейтронов в материале. Уширение дифракционных пиков приводит к уменьшению длины пути нейтронов, на которой можно измерить напряжения [2].

Исследования показали, что уширение, которое наблюдается только в ферритной стали и не наблюдается в аустенитной стали, связано с многократным рефракционным малоугловым рассеянием нейтронов на границах магнитных доменов [3-6]. При приложении к образцу постоянных магнитов с индукцией 0.5Т уширение пиков уменьшается и максимальная длина пути увеличивается (92 мм). Таким образом можно ожидать, что проводя измерения в достаточно сильном магнитном поле (>1.5Т) можно дополнительно увеличить длину пути нейтронов в ферритной стали, на которой можно измерить напряжения.

1. W. Woo, V. T. Em, B. S. Seong, E. Shin, P. Mikula, J. Joo, M., M. Kang, J. Appl. Cryst. 44, 747-754 (2011).

2. P. J. Withers, M. R. Daymond, M. W. Johnson, J. Appl. Cryst. 34, 737-743 (2001).

3. D. J. Hughes, M. T. Burgy, R. B. Heller, J. W. Wallace, Physical Rev. 75, 565-569 (1949).

4. R. J. Weiss, Physical Rev. 83, 379-389 (1951).

5. Каланов М., Шильштейн С.Ш., Соменков В.А. Препринт ИАЭ-2268, Институт Атомной Энергии им. И.В. Курчатова (1973).

6. S. Sh. Shilstein, V. A. Somenkov, J. Magnetism Magnetic Mater. 42, 193-197(1984).

Spherical neutron polarimetry in multiferroics under external stimuli

V. Hutanu^{1, 2}

¹ *Institut für Kristallographie, RWTH Aachen University, outstation at MLZ Garching, Germany*

² *JCNS Research Center Jülich, outstation at MLZ Garching, Germany*

Study of multiferroics, materials simultaneously having more than one primary ferroic order parameter, is a hot topic of material sciences. The most extensively studied class of these compounds is the family of magnetoelectric multiferroics, where ferroelectricity can be induced by various types of magnetic orderings via the relativistic spin-orbit interaction. As a consequence of the cross coupling between spins and electric polarization, the spectacular control of the ferroelectric polarization by external magnetic field and the manipulation of the magnetic order via electric field can often be realized in these systems. Depending on the symmetry and microscopic mechanism of the multiferroicity the coupling energy between magnetic and electric ordering parameters can significantly vary. Classical neutron diffraction often fails in the precise determining of the complex magnetic structure in the multiferroics due to the presence of the statistically distributed domains in the macroscopic sample. Using spherical neutron polarimetry (SNP), known also as 3D polarization analysis, it is possible not only to precisely determine the complex magnetic structures, but also to investigate in-situ its evolution with external parameters and to control the magnetic domains distribution under the influence of the external electric or/and magnetic field. Here we will present some SNP results on few different multiferroic materials. In some of them, e.g. square lattice 2D antiferromagnet $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$, even strong electric field does not change the magnetic order. However rather weak magnetic field is sufficient to create a mono-domain structure and to rotate spins in the plane. In other e.g. incommensurate (spiral) magnetic structure of the TbMnO_3 , solely electric field is sufficient to fully control the chirality of the magnetic structure. In the case of Cr_2O_3 both electric and magnetic fields should be applied in parallel in order to switch between the different antiferromagnetic domains.

1. V. Hutanu, A. P. Sazonov, M. Meven, G. Roth, A. Gukasov, H. Murakawa, Y. Tokura, D. Szaller, S. Bordács, I. Kézsmárki, V. K. Guduru, L. C. J. M. Peters, U. Zeitler, J. Romhányi, and B. Náfrádi, *Phys. Rev. B* 89, 064403, (2014)

**Измерение времени жизни нейтрона на установке ПИЯФ в ИЛЛ,
итоги и перспективы**

*А. К. Фомин, А. П. Серебров, А. Г. Харитонов, В. Е. Варламов,
Э. А. Коломенский, И. А. Краснощекова, А. В. Чечкин*

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

На данный момент наилучшая точность измерений времени жизни нейтрона достигнута в эксперименте ПИЯФ с гравитационной ловушкой ультрахолодных нейтронов (УХН). Новая установка с большой гравитационной ловушкой является дальнейшим развитием методов и подходов, применявшихся в предыдущем эксперименте. Планируется достичь точности измерений 0.2 с, что в 4 раза лучше существующего уровня точности. Для моделирования методом Монте-Карло составлена модель эксперимента. Эта модель позволяет заложить конкретное значение времени жизни нейтрона, затем повторить экспериментальную процедуру и увидеть, есть ли разница между заложенным и измеренным значениями. В результате моделирования определена систематическая неопределенность, связанная с методом вычисления эффективной частоты соударений ультрахолодных нейтронов в ловушке. Она составила 0.1 с. Также проведено моделирование различных конструктивных элементов установки. На текущий момент спектрометр изготовлен в ПИЯФ и установлен на пучке RF2/МАМ в ИЛЛ. Произведены испытания установки.

1. А.П. Серебров, А.К. Фомин, А.Г. Харитонов и др., ЖТФ 83, 136 (2013)

Рассеяние нейтронов для анализа процессов в Li-ионных аккумуляторах

А. М. Балагуров

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

С точки зрения изучения структуры материалов, применяемых в Li-ионных источниках электрического тока, и процессов, в них происходящих, важны следующие особенности взаимодействия тепловых нейтронов с веществом, радикально отличающие их от рентгеновских лучей: высокая чувствительность к легким элементам, способность различать элементы с близкими атомными номерами, способность различать изотопы, независимость когерентной длины рассеяния от переданного импульса, большое сечение магнитного взаимодействия, высокая проникающая способность. Их совокупность позволяет в нейтронных экспериментах получать информацию, которая, как правило, не может быть получена другими методами. В частности, на атомном уровне, т.е. с точностью долей нанометра фиксируются положение легких атомов (H, Li, C, O, F) в структуре материала, размещение и возможное упорядочение 3d-катионов (Ni, Mn, Co, Fe) по кристаллографическим позициям, определяется магнитная структура, т.е. положения, величины и направления магнитных моментов 3d-катионов. Высокая проникающая способность тепловых нейтронов, дает возможность сравнительно простой организации *in situ* экспериментов с модельными электрохимическими ячейками и реальными источниками тока, представляющими собой объемные объекты.

В докладе рассмотрены приложения основных методик рассеяния тепловых нейтронов – дифракции (атомная, магнитная структуры, а также микроструктура), малоуглового (крупномасштабные, ~ 200 Å, неоднородности) и неупругого (атомная и магнитная динамика, диффузионные процессы) рассеяния, рефлектометрии (состояние внешних и внутренних поверхностей раздела сред) и интроскопии (миграция ионов, изменения объемных характеристик электродов с разрешением ~ 50 мкм) – для характеристики электродных материалов Li-ионных аккумуляторов и анализа электрохимических процессов в ходе их заряда или разряда. Приведена информация об уже существующих возможностях на действующих источниках нейтронов. Рассмотрен ряд экспериментов, характеризующих современную ситуацию в этой области электрохимии. Приведены некоторые результаты недавно начавшихся дифракционных исследований Li-содержащих материалов и Li-ионных аккумуляторов на импульсном реакторе ИБР-2 в Объединенном институте ядерных исследований (Дубна).

Микроструктурная характеристика наноматериалов с использованием данных синхротронного эксперимента

*И.Н. Леонтьев¹, Н.Г. Леонтьев², А.А. Кульбаков¹, А.Б. Куриганова³,
Н.В. Смирнова³*

¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

² Азово-Черноморская государственная агроинженерная академия, Зерноград, Россия

³ Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ), Новочеркасск, Россия

Хорошо известно, что каталитическая активность Pt/C катализаторов для низкотемпературных топливных элементов существенно зависит от их микроструктурных характеристик, таких как: 1) средний размер частиц, 2) параметров распределения частиц по размерам, 3) форма наночастиц [1]. При этом, традиционно для определения среднего размера наночастиц используется хорошо известная формула Шеррера, а для определения формы наночастиц и распределения частиц по размерам используется просвечивающая электронная микроскопия.

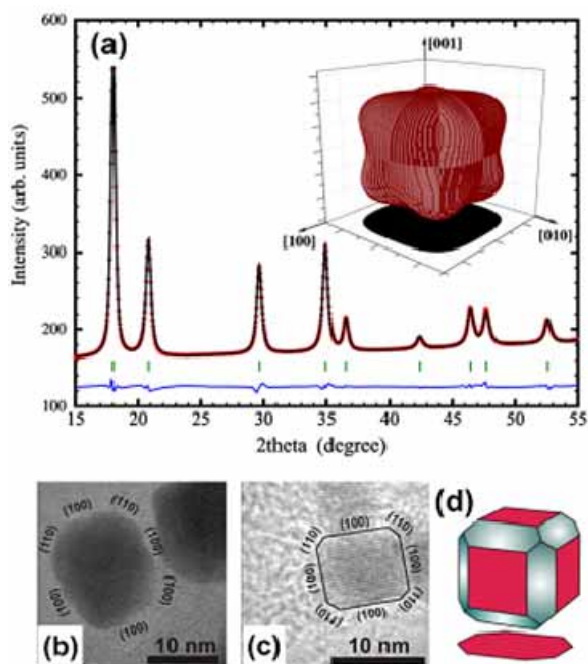


Рис. 1. Рентгенограмма Pt/C катализатора и соответствующая ей форма наночастиц

В докладе будут представлены методики определения параметров распределения частиц по размерам и формы наночастиц Pt/C катализаторов на основе данных рентгенографических исследований путём анализа анизотропии уширения дифракционных рефлексов (рис.1).

Помимо этого, на основе анализа параметров различных распределений частиц по размерам и соответствующей им форме дифракционных пиков будет показано, что ошибка в определении среднего размера наночастиц по формуле Шеррера может достигать 20%.

1. M. Dekker, A. Wieckowski, E. Savinova, C. Vayenas (Eds.), Catalysis & Electrocatalysis at Nanoparticle Surfaces, New York, 2003.

Analysis of Charging/Discharging Processes in Li-Ion Batteries by Neutron Diffraction at Pulsed Neutron Source

I. Bobrikov, A. Balagurov, N. Samoylova

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

In this work examples of *ex-situ* and *in-situ* neutron diffraction experiments with electrode materials for Li-ion batteries, performed at the HRFD time-of-flight (TOF) diffractometer, (the IBR-2 long-pulsed reactor, JINR) are presented. The experiments are important to characterize battery materials during electrochemical cycling and to find additional information about crystal structure of electrodes. An important advantage of TOF method is the possibility to work at the fixed geometry of the experiment, which allows selecting the optimal battery orientation relative to the directions of the incident and scattered neutron beams and, thus, to minimize the difficulties associated with complex internal structure of the battery. It was shown that charge/discharge process of Li-based real Li-ion battery can be effectively studied by TOF technique at the IBR-2 pulsed reactor. This work is supported by Russian Scientific Foundation (the RSF project № 14-12-00896).

Применение нейтронной стресс-дифрактометрии для исследования образцов-свидетелей, восстановленных различными методами сварки

Г.Д. Бокучава¹, П. Петров², И.В. Папушкин¹

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Институт электроники Болгарской академии наук, София, Болгария*

Одной из насущных проблем современной ядерной энергетики является контроль состояния металла реакторного корпуса в течение срока его службы. Важным источником информации об изменении свойств корпусных сталей, которые ухудшаются под воздействием нейтронного облучения, служит штатная программа образцов-свидетелей, которые периодически подвергаются механическим испытаниям для оценки механических свойств материала и работоспособности корпуса реактора. Для увеличения количества облучаемых образцов и обеспечения материаловедческого сопровождения эксплуатации корпуса на сверхпроектный период зачастую возникает задача реконструкции образцов-свидетелей после их механических испытаний с помощью различных видов сварки. При этом технология реконструкции не должна заметно изменять структуру и механические свойства материала для сохранения репрезентативности данных. Однако, остаточные напряжения, возникающие в результате практически любого сварочного процесса, могут оказывать на них значительное влияние. В связи с этим необходимо контролировать уровень остаточных напряжений после сварки в реконструированных образцах-свидетелях.

Методом нейтронной дифракции изучены распределения остаточных напряжений в образцах-свидетелях, восстановленных с помощью различных методов сварки: электронно-лучевой (EBW), лазерной (LBW) и дуговой (ASW). Эксперименты были выполнены на фурье-дифрактометре ФСД в ЛНФ ОИЯИ (Дубна). Результаты измерений показали, что минимальный уровень напряжений наблюдается в образце EBW - до 170 МПа. В двух остальных образцах уровень остаточных напряжений существенно выше: до 570 МПа для LBW образца и до 670 МПа для ASW образца.

Кроме того, по уширению дифракционных пиков был оценен уровень остаточных микродеформаций, который непосредственно характеризует плотность дислокаций в исследуемом материале. Распределение микродеформаций демонстрирует противоположную зависимость: максимальный уровень микродеформаций наблюдался в образце EBW - $3.8 \cdot 10^{-3}$, в образцах LBW и ASW уровень остаточных микродеформаций несколько ниже ($2.4 \cdot 10^{-3}$ и $2.9 \cdot 10^{-3}$, соответственно).

Структурное поведение литий-ионных аккумуляторов в реальных условиях эксплуатации

А.Т. Сенишин¹, О. Долотко¹, М.Й. Мюльбауэр^{1,2}, Г. Эренберг^{2,3}

¹ Центр Хайнц Майер-Ляйбнитц FRM@MLZ, Гархинг, Германия

² Технологический университет Дармштадта, Дармштадт, Германия

³ Технологический институт Карлсруэ, Карлсруэ, Германия

Достигнутый на сегодняшний день прогресс в сфере портативной электроники во многом обусловлен развитием электрохимических источников сохранения энергии. На данный момент в этом сегменте доминируют аккумуляторы на основе литий-ионной технологии, в основном благодаря их высокой энергетической плотности (емкости), низкому значению саморазряда и слабо выраженному «эффектом памяти». Seriously рассматривается использование литий-ионных аккумуляторов в электромобильной индустрии и в технологиях сохранения возобновляемой энергии. К сожалению широкое использование в данных сферах ограничено рядом недостатков литий-ионной технологии таких как относительно высокая цена, временная стабильность электрохимических характеристик, проблемы техники безопасности. Оптимизация вышеперечисленных свойств является приоритетной задачей, которая зачастую существенно усложняется необходимостью проведения исследований *in situ*.

Современный литий-ионный аккумулятор это сложный электрохимический прибор с множественными степенями свободы и сложным характером взаимодействий между ними. Детальное исследование процессов в литий-ионной электрохимической ячейке вместе с необходимостью предотвращения возможного окислирования компонентов ячейки, испарения\загрязнения электролита, изменения состояния заряда и т.д. требует использования прецизионных неразрушающих экспериментальных техник чувствительных к литию.

В этом плане нейтронное рассеивание (особенно в комбинации с электрохимическими методами исследований) в силу своих свойств является уникальным инструментом для исследований электрохимических процессов [1]. В данном докладе будут приведены результаты использования комбинации трех экспериментальных техник нейтронного рассеивания (радиографии\томографии, высокораздельной нейтронной диффракции и пространственно-разрешающей диффракции нейтронов) с электрохимическими измерениями для исследований стандартного литий-ионного аккумулятора типа 18650 (емкостью 2600 мАч) с графитным анодом и LiCoO₂ катодом.

1. H. Ehrenberg, A. Senyshyn, M. Hinterstein, H. Fuess (2012). In Situ Diffraction Measurements: Challenges, Instrumentation, and Examples. In E.J. Mittermeijer & U. Welzel (Eds.), Modern Diffraction Methods (528). Weinheim: Wiley-VCH.

**Возможности малоуглового нейтронного и синхротронного рассеяния
для исследования везикулярных переносчиков лекарств**

М. А. Киселев

Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

Институт биомедицинской химии РАМН ведет разработку и внедрение лекарства на основе фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС) [1]. Малоугловое рассеяние нейтронов и рентгеновских лучей является наиболее адекватным методом исследования структуры и свойств ФТНС. Исследования ФТНС на синхротронном источнике показали, что ФТНС является везикулярной системой.

Доклад посвящен следующим вопросам:

- Возможности метода разделенных форм факторов для исследования везикулярных систем на нейтронных и синхротронных источниках [2,4].
- Контрастирование везикулярных систем дисахаридами на синхротронных источниках [3].
- Результатам исследования ФТНС на источнике синхротронного излучения КИСИ НИЦ «Курчатовский институт».

Показано, что параметры ФТНС в терапевтических концентрациях могут определяться методом малоуглового рассеяния на синхротронном источнике.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 14-12-00516.

1. О.М. Ипатова, Т.И. Торховская, и др. Вестник Российской академии медицинских наук. 4, 37 (2013).
2. М.А. Kiselev, E.V. Zemlyanaya, et al. European Biophys. J. 35, 477 (2006).
3. М.А. Kiselev, S. Wartewig, et al. Chemistry and Physics of Lipids. 123, 3 (2003)
4. М.А. Киселев, Е.В. Земляная, и др. Кристаллография (2014) в печати.

**Исследование наночастиц, предназначенных для адресной доставки
лекарств методами малоуглового синхротронного излучения
и рассеяния нейтронов. Внутренняя структура и функциональность**

С. К. Филиппов¹, П. Хитил¹, П. Конарев², К.М. Пападакис³, А. Радулеску⁴,
Й. Плейшил¹, П. Штепанек¹, Т.Этрих¹, К. Ульбрих¹, Д. Свергун²

¹ Институт макромолекулярной химии АН ЧР, Прага, Чехия

² EMBL, DESY, Гамбург, Германия

³ Технический университет Мюнхена, Гархинг, Германия

⁴ Нейтронный исследовательский центр, Гархинг, Германия

В работе сообщается об исследовании внутренней структуры наночастиц, которые являются эффективными носителями для адресной доставки лекарств. Химическая структура исследованных конъюгатов представляет собой макромолекулу на базе *N*-(2-гидроксипропил) метакриламида (ГПМА), который ковалентно связан рН чувствительной связью с противораковым препаратом доксорубицин и определенным количеством холестерина. Исследования разбавленных растворов конъюгатов в фосфатном буфере 5.0 and 7.4, проведенные методом малоуглового рассеяния синхротронного излучения и рассеяния нейтронов, а также флуоресцентной корреляционной спектроскопии и рассеяния света подтверждают формирование наночастиц при концентрации выше критической. Было установлено, что содержание любого количества холестерина приводит к формированию анизотропных наночастиц [1,2]. Результаты показывают, что размер, анизотропия и число агрегации наночастиц растут с увеличением количества холестериновых фрагментов в макромолекуле. Эксперименты с малоугловым рассеянием синхротронного излучения позволили определить трехмерную структуру наночастиц собранных из конъюгатов ГПМА и холестерина. Используя *ab-initio* вычисления было показано, что наиболее вероятной структурой наночастиц является структура ожерелья в которой эллипсоидные кластеры составлены, в основном, из холестерина покрытого опушкой из ГПМА. Сами кластеры соединены перемычками образованными гидрофильными ГПМА цепочками. Используя сочетание разных методов было доказано, что доксорубицин не находится исключительно внутри холестериновых кластеров (как предполагалось раньше), а равномерно распределен по всей наночастице включая гидрофильную опушку составленную из ГПМА [1,2]. Такая структура, по нашему мнению, является одной из причин высокой противораковой эффективности исследованных конъюгатов.

1. S. K. Filippov, P. Chytil, et al., *Biomacromolecules* 13, 2594-2604 (2012).

2. S. K. Filippov, J. M. Franklin, et al., *Biomacromolecules*, 14, 4061-4070 (2013).

Спирт или вода? Проблема проницаемости оксид-графеновой мембраны с точки зрения рефлектометра

А.А. Воробьев¹, Д.Ю. Чернышов², А.В. Талызин³

¹*Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

²*Swiss–Norwegian Beam Lines at ESRF, 6 rue Jules Horowitz, France*

³*Department of Physics, Umeå University, Umeå, Sweden*

Используя изотопное контрастирование, метод нейтронной рефлектометрии (НР) позволяет определять количество молекул различных растворителей внедренных (интеркалированных) в тонкие мембраны. В данном исследовании метод был применен для точного определения количества спирта и тяжелой воды, внедренных в оксид-графеновую (ОГ) мембрану из водно-спиртовой смеси. Таким образом была проверена эффективность недавно предложенного [1] применения подобных мембран для разделения паров воды и спирта.

Эффект воздействия паров D₂O, этанола и смеси D₂O/этанол на тонкую (30 нм) ОГ мембрану был изучен методом НР. Межплоскостное расстояние и количество внедренного растворителя определялись одновременно в зависимости от длительности воздействия паров растворителя. Существенное различие в плотности нейтронной длины рассеяния для D₂O и этанола позволяет различать внедрение каждой компоненты из двухкомпонентной смеси. В состоянии насыщения количество внедренного растворителя, приходящегося на формульную единицу ОГ, составляет 1.4 молекулы (1.4 монослоя) для D₂O и 0.45 молекулы (1 монослой) для этанола. Воздействие на ОГ мембрану двухкомпонентной смеси D₂O/этанол приводит к внедрению обеих компонент даже в случае значительно большей концентрации этанола. Смешанный слой D₂O/этанол внедренный между слоями ОГ оказывается обогащен водой, что происходит из-за сравнительно медленной диффузии этанола в ОГ [2].

1. R. R. Nair, H. A. Wu, P. N. Jayaram, I. V. Grigorieva, A. K. Geim, *Science* 2012, 335, 442-444.

2. A. Vorobiev, A. Dennison, D. Chernyshov, V. Skrypnichuk, D. Barbero, A. V. Talyzin, accepted in *Nanoscale*.

**Комплементарные нейтронно-синхротронные исследования
палеонтологических объектов**

*Е.С. Коваленко¹, А. А. Калоян¹, А.В. Пахневич², К.М. Подурец¹,
В.А. Соменков¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Палеонтологический институт РАН, Москва, Россия

В последние годы важным неразрушающим методом для изучения внутреннего строения палеонтологических объектов стала рентгеновская томография. Томография имеет большое значение для исследования редких и хрупких образцов, типовых экземпляров, внутреннее строение которых должно быть изучено, но разрушать их нельзя. Этим методом были получены данные о строении большого числа палеонтологических объектов. Однако также были установлены определенные ограничения рентгеновской томографии. Это, во-первых, недостаточный контраст на изображениях, так как в составе ископаемых объектов вымершей флоры и фауны часто содержатся минералы, близкие по поглощению рентгеновских лучей. Во-вторых, размеры и толщина объектов ограничены из-за недостаточной глубины проникновения рентгеновского излучения. В то же время развитие в мире и в России источников нейтронного и синхротронного излучения делают актуальным использование этих возможностей для палеонтологии. Нейтроны имеют большую проникающую способность и свойство различать компоненты, неразличимые для рентгеновских лучей. Синхротронное излучение имеет более высокую яркость по сравнению с лабораторными приборами, что дает дополнительные возможности повышения контраста. В связи с этим представляет интерес исследование новых возможностей для изучения палеонтологических объектов, связанных с применением синхротронного и нейтронного излучения.

На исследовательском реакторе ИР-8 и в Курчатовском центре синхротронного излучения были выполнены эксперименты по нейтронной и синхротронной томографии различных ископаемых беспозвоночных (иглокожих, брахиопод и т.п.). Показано, что нейтронная томография позволяет различать минералы и породы, неразличимые для рентгеновского излучения. На примерах некоторых палеонтологических объектов продемонстрированы преимущества томографии с использованием синхротронного излучения и тепловых нейтронов. Полученные результаты показывают, что применение комплексного подхода к исследованиям геологических и палеонтологических объектов методами томографии, дифракции и другими на синхротронном излучении и тепловых нейтронах весьма перспективно.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования "Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий" в рамках гранта РФФИ 14-22-01001-офи_м.

Нейтроннографические исследования фазовых превращений в аморфных фуллеритах и их взаимодействия с металлами

П.А. Борисова¹, М.С. Блантер², В.А. Соменков¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Московский государственный университет приборостроения и информатики,
Москва, Россия

Кристаллические фуллериты C₆₀ под воздействием температуры и давления превращаются в различные полимеризованные фазы, аморфный и кристаллический графит или алмаз [1]. Аналогичные исследования для аморфных фуллеритов выполнены лишь при малых давлениях [2,3]. Поэтому в данной работе было исследовано влияние термического и термобарического воздействия на аморфные фуллериты и их взаимодействие с металлами (Fe, Al).

Аморфные фуллериты C₆₀ (99.5%) были получены механическим размолотом в шаровых мельницах типа Fritsch и далее спечены при давлениях до 8 ГПа и температурах до 1500°C. Структура полученных образцов исследована методами дифракции нейтронов и рентгеновских лучей. При вакуумном отжиге обнаружена в [2] промежуточная аморфная графеноподобная фаза в интервале температур ~ 1000-1300°C, а при температурах выше 1400°C образуется графитоподобная фаза. Под воздействием давления и при повышении температуры, за счет давления возникает более плотная графитоподобная фаза (выше 750°C при 4.5 ГПа, выше 650°C при 8 ГПа) по сравнению с промежуточной аморфной графеноподобной фазой и аморфными фуллеритами. Таким образом, после спекания (приложения давления и температуры) аморфных фуллеритов имеет место меньшее разнообразие фаз, чем в случае с кристаллическими фуллеритами.

При взаимодействии аморфных фуллеритов с железом при температурах до 1200°C и повышенном давлении в ходе последующего охлаждения происходит образование неравновесных структур, отличающихся от структуры как отожженной, так и закаленной стали. Установлено также повышение удельной твердости аналогичных алюминиевых композитов.

Работа поддержана РФФИ по гранту 13-02-00208а.

1. V.V. Brazhkin, A.G. Lyapin, J. Supperhard Materials 34(2012) 400.
2. С.С. Агафонов, В.П. Глазков, И.Ф. Кокин, В.А. Соменков ФТТ 52 (2010) 1245.
3. П.А. Борисова, С.С. Агафонов, М.С. Блантер, В.П. Глазков, В.А. Соменков Известия РАН. Серия физическая 77(2013),1634.

**Строение мицелл додециламмоний
2-акриламидо-2-метилпропансульфоната (ДДА-АМПС)
в водно-диоксановых смесях по данным малоуглового
рассеяния нейтронов**

*Ю.В. Кульвелис¹, В.Т. Лебедев¹, Т.М. Щербинина², И.М. Зорин²,
А.Ю. Билибин²*

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

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

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследовано строение растворов мономера додециламмоний 2-акриламидо-2-метилпропансульфоната (ДДА-АМПС) в тяжелой воде (D₂O), дейтерированном диоксане (D-диоксан) и водно-диоксановых смесях.

Молекулы ДДА-АМПС в D₂O образуют мицеллы определенных размеров (1,5-2 нм), при этом раствор строго структурирован – соседние мицеллы находятся на определенном расстоянии, зависящем от концентрации мономера, что выражается в четком корреляционном пике на кривых рассеяния нейтронов. В D-диоксане, по причине его слабой полярности, наблюдаются обратные мицеллы таких же размеров, но в 2-3 раза меньшем количестве, чем в D₂O, и корреляции между соседними мицеллами проявляются слабее. В водно-диоксановых смесях наблюдали постепенный переход от прямых мицелл к обратным при уменьшении доли D₂O в растворителе.

Результаты будут иметь значение для выбора полярности растворителя и способа синтеза полимера заданной морфологии из данного мономера [1].

1. Polymerization of Dodecylammonium-2-acrylamido-2-methylpropane Sulfonate in Solvents with Different Dielectric Constants and Study of the Resulting Ionic Complexes / A.Yu. Bilibin, T.M. Sukhanova, N.I. Matuschkin, A.B. Mel'nikov, I.M. Zorin // Macromolecular Symposia. – 2012. – V. 317-318, Is.1. – P.160-168.

**Влияние пептидных токсинов на протонактивируемый
канальный комплекс**

П.И. Трояновская¹, А.И. Фисюнов¹, О.А. Крыштал¹

¹ Институт физиологии НАНУ, Киев, Украина

Современные литературные данные убедительно указывают на важную роль протон-чувствительных ионных каналов (ASIC) в процессах механорецепции и ноцицепции, в периферической нервной системе и процессах обучения и памяти, в центральной нервной системе [1]. Но к этим каналам практически не существует малых молекул ингибиторов кроме амилорида и его производных, и относительно нового вещества А-317567 [2]. Таким образом, наиболее актуальной проблемой фармакологии ASIC рецепторов является поиск специфических по отношению к разным типам ASIC каналов блокаторов в форме стабильных малых молекул.

В данной работе методом фиксации потенциала patch-clamp было исследовано действие пептидных токсинов морской анемоны *U. Grebelnyi* на ASICs культуры DRG-нейронов крыс. В серии экспериментов, где изучалось действие Ugr9-1 и Ugr9-3 токсинов, было показано, что инкубация на протяжении 10-15 минут в концентрации 100 нМ для каждого из этих токсинов приводила к ускорению кинетики десенситизации, как смешанных, так и быстрых ASIC токов, а так же к небольшому (около 10-20%) уменьшению амплитуды этих токов. Все эффекты были полностью обратными при отмывании от компонентов токсинов на протяжении 15-25 минут. Важно отметить, что действие токсина Ugr9-3 приводило к ускорению кинетики десенситизации в 2.5 и в 1.4 раза соответственно для смешанных и быстрых ASIC токов.

Как известно из [2] в формировании смешанного ASIC тока в DRG нейронах могут быть задействованы все типы ASIC рецепторов (ASIC1a,b, ASIC2a,b и ASIC3), в то время как в формировании быстро десенситизирующего ASIC тока участвуют лишь ASIC1a,b рецепторы. Таким образом, полученные данные в этой работе можно идентифицировать для определения типов ASIC рецепторов и для объяснения механизмов их модуляции под действием этих токсинов с помощью экспериментов с использованием экспрессии определенных типов ASIC рецепторов.

1. O. Krishtal J.Trends Neurosci. 26 (2003).
2. E. Lingueglia J. Of Bio.Chem. 282, 24 (2007).

**Фрактальные свойства распределения хроматина и точек репликации
ДНК в клетках высших организмов, полученные методами МУРН
и конфокальной микроскопии**

*И.А. Юнг^{1, 2}, В. Пипич³, Р.А. Пантина¹, Д.В. Лебедев¹, М.В. Филатов¹,
В.В. Исаев-Иванов¹*

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

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

³ *Jülich Center for Neutron Science outstation at MLZ, München, Germany*

В хроматине проходят такие основные ядерные процессы как транскрипция ДНК, репликация, репарация. Для обеспечения этих процессов клеточным машинам необходим доступ к развернутой структуре ДНК, находящейся преимущественно в свернутом состоянии, что препятствует непосредственному воздействию на нить ДНК. Клеточным машинам приходится взаимодействовать со сложной трехмерной структурой хроматина. Поэтому изучение структуры хроматина является важной задачей.

В этой работе исследовалась как непосредственное распределение плотности хроматина в ядрах высших клеток методом МУРН, так и функциональное проявление распределения хроматина – распределение центров репликации ДНК методом флуоресцентной конфокальной микроскопии. Для измерения МУРН использовались ядра клеток HeLa и глиомы человека. Методом контрастирования выделена компонента рассеяния от нуклеиновых кислот. Полученная степенная зависимость интенсивности рассеяния от вектора рассеяния свидетельствует о фрактальном распределении генетического материала в ядре. Методом конфокальной микроскопии исследовалось распределение центров репликации ДНК в ядрах клеток HeLa и глиомы человека, которые визуализировались посредством флуоресцентно меченых антител к аналогу тимидина BrdU. При анализе автокорреляционной функции распределения центров репликации в пространстве были получены фрактальные характеристики распределения.

Таким образом, методом МУРН была определена фрактальная размерность распределения плотности нуклеиновых кислот в ядрах клеток HeLa и глиомы, 2.1 и 2.8 соответственно, на размерах, больших 150 нм. Данные конфокальной микроскопии указывают на фрактальные свойства пространственного распределения центров репликации, при этом большая размерность наблюдалась в ядрах клеток глиомы, что соотносится с данными МУРН.

**Структурные особенности нуклеопротеиновых частиц вируса гриппа
A/H3N2 дикого типа и его холодоадаптированного штамма по данным
малоуглового рассеяния**

В.В. Егоров^{1,5}, *Д.В. Лебедев*¹, *А. Радулеску*², *А.А. Шалджян*⁵, *А.Н. Горшков*⁵,
*Я.А. Забродская*⁵, *М.В. Сергеева*⁵, *А.И. Куклин*^{3,4}, *М.А. Плотникова*⁵,
*А.Б. Комиссаров*⁵, *П.А. Некрасов*⁵, *С.А. Клотченко*⁵, *А.В. Васин*^{5,6},
*Л.М. Цыбалова*⁵

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

² *Jülich Centre for Neutron Science, München, Germany*

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Научно-образовательный центр «Бионанофизика», Долгопрудный, Россия*

⁵ *«НИИ гриппа» Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *Институт прикладной математики и механики Санкт-Петербургского
государственного политехнического университета, Санкт-Петербург, Россия*

Белок NP является одним из восьми структурных белков вируса гриппа. В составе РНК-белкового комплекса он принимает участие как в упаковке генетического материала вируса, так и в репликации. В вакцинном штамме, полученном в процессе холодной адаптации вируса гриппа A/H3N2/НК/68, была обнаружена аминокислотная замена E292G. Можно предположить, что наличие такой замены влияет на структуру рибонуклеиновых частиц (РНЧ) при различных температурах.

Методами малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния было показано, что в диапазоне температур от 15 до 37°C структуры РНЧ вирусов гриппа штаммов, основанных на A/НК/68, - как нормального, так и холодоадаптированного, - претерпевают значительные изменения. При 15°C данные МУР могут быть интерпретированы в рамках модели сильно вытянутых частиц с поперечным радиусом гирации около 40 Å для обычного и 50 Å для холодоадаптированного штамма, что согласуется с данными о двойной спиралевидной структуре РНЧ штамма H1N1, полученными ранее рядом авторов по данным криоэлектронной микроскопии. Повышение температуры с 15 до 32 и 37°C приводит к значительным изменениям в спектрах МУРН, при этом наблюдаются заметные отклонения от закона Гинье в малых углах, что, вероятнее всего, обусловлено возросшей полидисперсностью РНЧ. На основании анализа данных МУРН с использованием методов *ab-initio* восстановления формы частиц можно предположить, что РНЧ H3N2 имеют тенденцию к диссоциации в отдельные спиралевидные филаменты, что частично подтверждается измерениями с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Различия в спектрах МУРН РНЧ нормального и холодоадаптированного штаммов, наблюдаемые при 32 и 37°C, указывают на роль мутации холодной адаптации в стабильности комплексов NP.

Изучение комплексов цитохрома С с монослоем кардиолипина

*М.А. Марченкова¹, А.С. Бойкова¹, К.Б. Ильина¹, А.Ю. Серегин¹,
С.Н. Якунин², Ю.А. Владимиров^{1,3}, Е.Ю. Терещенко^{1,2}, М.В. Ковальчук^{1,2}*

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

³ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

Понимание ключевых биофизических процессов, протекающих в клетках, позволяет разрабатывать средства и способы управления ими, как лекарственными средствами, так и методами терапии, а также создавать новые методы медицинской диагностики и инструменты для них (например, гибридные хеми-/биосенсоры).

Один из процессов, вызывающий пристальный интерес уже на протяжении нескольких десятилетий – апоптоз (запрограммированная смерть клетки). Один из механизмов запуска связан с выходом белка цитохрома С (Цит С) из митохондрий с последующим запуском каскада апоптотических реакций в клетке. Выход Цит С становится возможным благодаря превращению цитохрома в пероксидазу при его взаимодействии с кардиолипином (КЛ), входящим в состав мембраны митохондрий, что приводит к перекисному окислению липидов и, следовательно, повреждению мембраны. В настоящее время активно изучаются процесс взаимодействия цитохрома С с кардиолипином и структура их комплекса [1-3]. Одно из перспективных направлений работы – исследование процесса самоорганизации системы Цит С-КЛ с использованием адекватной модели биологической мембраны в виде липидного монослоя на поверхности жидкости.

В работе представлено систематическое исследование взаимодействия Цит С с монослоями природного и синтетического кардиолипина на поверхности жидкости. Изучена кинетика образования белково-липидного комплекса при различных условиях, исследована стабильность и обратимость формируемой системы, предложена количественная модель белково-липидной системы. Методом стоячих рентгеновских волн изучен процесс самоорганизации Цит С-КЛ системы на поверхности жидкости и структура системы, перенесенной на твердые подложки.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ №14-02-31431 мол_a и гранта Президиума РАН (П-24).

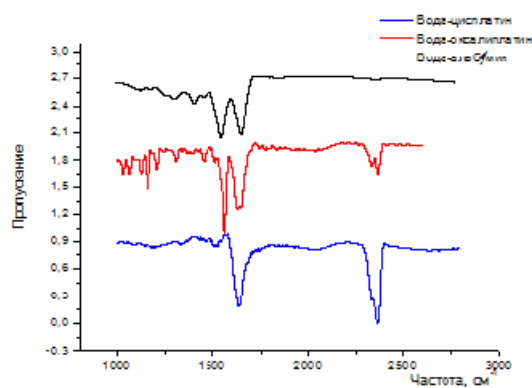
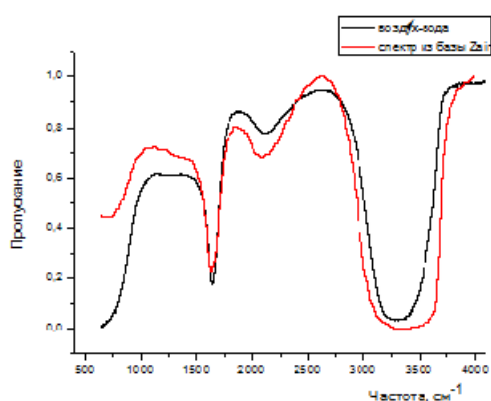
1. L.J. McClellanda, T.C. Moub, et al., PNAS 111, 18 (2014).
2. Ю.А. Владимиров, Е.В. Проскурнина и др., Биохимия, 10 (2013).
3. C. L. Bergstrom, P. A. Beales, et al., PNAS 110, 16 (2013).

Исследование лекарственных препаратов в физиологических растворах

Г.А. Хашибашев, А.А. Гуда, О.Е. Положенцев, А.В. Солдатов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В настоящей работе было проведено исследование взаимодействия молекул лекарственных препаратов с биологическими тканями на примере анализа ИК-спектров пропускания противораковых препаратов на основе платины в различных физиологических растворах и соединениях.



Измерения проводились на ИК Фурье-спектрометре ФСМ 1202. Фурье-спектроскопия - метод оптической спектроскопии, позволяющий получать спектр в результате обратного Фурье-преобразования интерферограммы исследуемого излучения, зависящей от оптической разности хода двух лучей и представляющей собой Фурье-образ спектра (функцию распределения энергии излучения по частоте). Целью этой работы было исследование взаимодействия молекулы цисплатина, оксалиплатина с белком альбумином крови. Была отработана методика измерения жидких образцов, определены предельные концентрации, доступные для измерений и получены экспериментальные данные для серии модельных растворов.

**Нейтроннографический текстурный анализ горных пород
и конструкционных материалов в ЛНФ ОИЯИ**

Р.Н. Васин

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Многие материалы – металлы, керамики, горные породы – являются поликристаллами, состоящими из зёрен различного размера, формы и ориентировки. Кристаллографическая текстура – это преимущественная ориентировка зёрен в поликристаллическом материале. В ходе кристаллизации, рекристаллизации, пластической деформации, структурных фазовых переходов формируются различные текстуры, обуславливающие анизотропию физических свойств поликристаллов. Среди методов измерения кристаллографических текстур дифракция тепловых нейтронов выделяется возможностью исследовать объёмные образцы, таким образом получая статистически достоверную информацию о преимущественных ориентировках большого числа зёрен. Это важно при исследованиях горных пород, часто характеризующихся большими размерами зёрен. Дифрактометр СКАТ [1, 2] на пучке 7 импульсного реактора ИБР-2 (Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна) позволяет исследовать образцы объёмом до 125 см³, обладает хорошим разрешением по межплоскостным расстояниям d , при котором удаётся разделять дифракционные пики многофазных материалов, и отличным угловым разрешением на полюсных фигурах, позволяющим измерять очень острые текстуры. Нейтроннографический текстурный анализ на дифрактометре СКАТ успешно применяется для решения различных задач материаловедения и геофизики (например, [3-6]).

1. K. Ullemeyer et al. Nuclear Inst Meth A 412, 80 (1998).
2. R. Keppler et al. J App Cryst (2014, in press).
3. А.Н. Никитин и др. Кристаллография 876, 53 (2008).
4. T. Lokajicek et al. Carbon 1374, 49 (2011).
5. V.V. Sumin et al. J Nucl Mater 64, 421 (2012).
6. H.-R. Wenk et al. Tectonophysics 123, 570-571 (2012).

**Спиновая структура в MnSi вблизи T_C в магнитном поле:
от критических флуктуаций спирали к конусной спирали
и скирмионной решетке**

*Н.М. Чубова¹, Е.В. Москвин^{1,2}, В.А. Дядькин^{1,2}, Ch. Dewhurst⁴,
С.В. Григорьев^{1,2}*

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

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

³ *Европейский источник синхротронного излучения, Гренобль, Франция*

³ *Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция*

Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов изучена трансформация спиновой структуры MnSi в критическом диапазоне температур вблизи $T_C = 29$ К в магнитном поле. $H_A \sim 0,17$ Тл. С приложением поля вблизи T_C наблюдаются 3 различных магнитных состояния системы: (i) флуктуации спиновой спирали, беспорядочно ориентированные с волновым вектором k_F ; (ii) одномерная коническая спираль с $k_C \parallel H$ и (iii) гексагональная спиновая сверхструктура с $k_H \perp H$.

Известно, что в нулевом поле в MnSi наблюдается сложный переход из парамагнитной фазы в фазу спиновой спирали. При этом можно выделить три переходные области. Из парамагнитного состояния система переходит в состояние флуктуирующей спирали при $T_{DM} \approx 31,5$ К, при этом функция рассеяния нейтронов на этих флуктуациях описывается функцией Лоренца с центром при $Q = k_F$ и шириной k_F равной k_F . С понижением температуры система переходит в состояние флуктуирующей, 100%-киральной спирали при $T_k \approx 30$ К, при этом $k_F \sim k_F/2$. И, наконец при $T_C = 29$ К система переходит в упорядоченную спиральную структуру [1].

При охлаждении в поле $H = 0,17$ Тл при $T = T_{DM}$ появляются коническая спираль, которая добавляется к критическим флуктуациям плоской спирали (при этом $k_C \neq k_F$). При дальнейшем охлаждении к этим объектам при $T = T_k$ добавляется скирмионная структура (А-фаза). При $T = T_C$ сосуществуют коническая спираль и скирмионная решетка на фоне критических флуктуаций обычной спирали. Следует отметить, что ширина дифракционного пика от конической спирали и от скирмионной решетки ограничена разрешением установки. Скирмионная решетка доминирует над конической спиралью в узком диапазоне температур от 28 К до $T_C = 29$ К. Их волновые вектора при этом практически равны $k_H = (0.987 \pm 0.003) k_C$. При дальнейшем охлаждении ниже $T = 28$ К скирмионная решетка быстро исчезает и наблюдается только коническая фаза.

Таким образом, экспериментально показано, что:

- скирмионная решетка является гексагональной спиновой структурой созданной теми же взаимодействиями (ферромагнитным обменом и ДМ взаимодействием) как и простая спиновая или коническая спираль,

поскольку $k_H = k_C$ во всём диапазоне температур, а $k_H = k_C$ ограничены разрешением установки;

- критические флуктуации не коррелируют со скирмионной решеткой, поскольку $k_H \neq k_F$ и $k_H \neq k_F$;

- коническая спираль оказывается энергетически выгоднее скирмионной решетки в области критических температур выше T_C , и проигрывает этой сверхструктуре только в узкой области температур ниже T_C .

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ No14-02-31146\14 мол_а.

1. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, E. V. Moskvina, V. A. Dyadkin, P. Fouquet and H. Eckerlebe, Phys. Rev. B 81 (2010) 144413.

Неустойчивость спиральной спиновой структуры соединения MnGe и фазовый переход порядок-беспорядок

*Е. Алтынбаев^{1,2}, S.-A. Siegfried³, В. Дядькин^{1,4}, Е. Москвин^{1,2}, D. Menzel⁵,
A. Heinemann³, C. Dewhurst⁶, А. Цвященко⁷ и С. Григорьев^{1,2}*

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

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

⁵Technische Universitat Braunschweig, Braunschweig, Germany

⁶Institute Laue-Langevin, Grenoble, France

⁷Институт физики высокого давления РАН, Троицк, Московская область, Россия

Магнитная структура кубического геликоидального магнетика MnGe исследовалась при помощи экспериментов СКВИД-магнитометрии и малоуглового рассеяния нейтронов в широком температурном диапазоне (10—300 К). Моногерманид марганца претерпевает сложный фазовый переход из геликоидального в парамагнитное состояние, который размыт по температуре более, чем на 100 К выше критической температуры $T_N = 130$ К. Более того, геликоидальная структура нестабильна при температурах ниже T_N . На картине малоугловой дифракции это проявляется в том, что Брэгговский рефлекс при значении переданного импульса $k_h \approx 2$ нм⁻¹ состоит из Гауссового (рассеяние на спиновых спиралах) и Лоренцевого (рассеяние на флуктуациях спиновых спиралей) вкладов. Вклад Гауссовой функции в геликоидальный рефлекс доминирует над Лоренцевым при низких температурах. При температуре T_N соотношение вкладов кардинально меняется. При низких температурах, геликоидальные флуктуации сопровождаются спиновыми возбуждениями магнитной структуры, что наблюдается на картине дифракции в виде дополнительного Q -независимого рассеяния при значениях переданного импульса $Q < k_h$. Вклады в рассеяние нейтронов на геликоидальных флуктуациях и спиновых возбуждениях увеличиваются с ростом температуры по одному и тому же закону $\exp(T/T_a)$, где температура активации $T_a = 80$ К. Оба этих вклада в рассеяние присутствуют выше температуры T_N , и хорошо разрешимы вплоть до температуры T_{DM} , после которой вклады сильно перемешиваются. При температурах выше $T_{SC} = 175$ К они превращаются в диффузное рассеяние, которое хорошо описывается законом Гаусса, что свидетельствует о наличии в системе ферромагнитных неоднородностей с обратной корреляционной длиной $\kappa = 2$ нм⁻¹. Критические температуры T_N и T_{SC} совпадают с особыми точками температурной зависимости намагниченности.

Изучение магнитной и электронной структуры кубической фазы высокого давления TbGe_{2.85}

Д.А. Саламатин^{1,2}, А.В. Цвященко^{1,3}, С.Е. Кичанов², В.А. Сидоров¹,
А. Величков², А.В. Саламатин², Л.Н. Фомичева¹, А.Е. Петрова¹,
Г.К. Рясный³, А.В. Николаев³, Д.П. Козленко², М. Budzynski⁴,
Р.А. Садыков⁵, D. Menzel⁶

¹ Институт физики высокого давления РАН, Троицк, Россия

² Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, Москва, Россия

⁴ Institute of Physics, M. Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

⁵ Институт ядерных исследований РАН, Троицк, Россия

⁶ Institute of Condensed Matter Physics, TU Braunschweig, Braunschweig, Germany

Соединение TbGe_{2.85} было синтезировано при давлении 8 ГПа, которое кристаллизовалось с кубической структурой типа AuCu₃ (пр. группа $Pm\bar{3}m$ и $a = 4.287 \text{ \AA}$) [1]. Из зависимостей сопротивления, теплоёмкости и магнитной восприимчивости было определено, что при $T_{CDW} = 160 \text{ K}$ в TbGe_{2.85} образуется волна зарядовой плотности. Из измерений магнитной восприимчивости была определена температура антиферромагнитного перехода $T_N = 19 \text{ K}$. Измерения дифракции нейтронов показали, что при $T < 19 \text{ K}$ в TbGe_{2.85} образуется несоизмеримая антиферромагнитная спираль с волновым вектором $k = 2\pi/a(0.5, 0, 0.1616)$. Магнитный момент ионов Tb составил $7.8 \mu_B$. Методом возмущенной угловой гамма-гамма корреляции были измерены магнитные B_{hf} и электрические V_{zz} сверхтонкие поля на ядрах ¹¹¹In/¹¹¹Cd, которые были введены в узлы Ge решетки TbGe_{2.85}. При $T > T_N$ наблюдалась одна квадрупольная частота $\nu_Q = 37.5(5) \text{ MHz}$ с параметром асимметрии $\eta = 0$. В магнитно упорядоченном состоянии (при $T < T_N$) наблюдалось два магнитных сверхтонких поля ($B_{hf1} = 2.8 \text{ T}$ и $B_{hf2} = 4.0 \text{ T}$). По результатам измерения предлагается магнитная структура. Мы предполагаем, что волна зарядовой плотности приводит к исчезновению центра инверсии в кубической структуре TbGe_{2.85} и появлению анизотропии Дзялошинского-Мория (ДМ). Из-за конкуренции обменного взаимодействия и взаимодействия ДМ и происходит образование антиферромагнитной спирали [2, 3].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-02-00001 и Программ ОФН РАН (ФЭЧФЯФЯТ и ФССВ).

1. A.V. Tsvyashchenko, et al., *J. of Alloys and Compounds* 552, 190 (2013).

2. P. Bak and M. H. Jensen, *J. Phys. C* 13, L881 (1980).

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

Исследование лантан бариевых оксидов кобальта под высокими давлениями

*А.В. Руткаускас¹, Д.П. Козленко¹, С.Е. Кичанов¹,
Б.Н. Савенко¹, Е.В. Лукин¹, И.О. Троянчук²*

¹ *Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Научно-практический центр НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь*

Сложные оксиды кобальта проявляют множество различных физических свойств: гигантское магнитосопротивление, переходы диэлектрик – металл, орбитальное и зарядовое упорядочение и т. д. Изучение и объяснение которых является одним из приоритетных направлений физики конденсированных сред. Эти свойства могут найти широкое технологическое применение в качестве материалов для альтернативных источников энергии, катализаторов, электродов в топливных элементах, мембранах для сепарации кислорода, запоминающих устройств и т.д.

В нашей работе представлены результаты исследований двух кобальтитов $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_{2.8}$ и $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{CoO}_3$.

Соединение $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_{2.8}$ было исследовано методами нейтронной и рентгеновской порошковой дифракции при высоких давлениях в диапазонах давлений до 5 ГПа и 30 ГПа соответственно, а также в температурном интервале от 10 К до 300 К. Было установлено, что при нормальном давлении и низких температурах данное соединение имеет кубическую структуру с пространственной группой $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ и является антиферромагнетиком с G-типом упорядочения до 215 К. При давлении 2.8 ГПа происходит переход из кубической $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ в тетрагональную структуру с пространственной P/mmm . Данный переход сопровождается изменением магнитной структуры данного кобальтита из антеферромагнитной в ферромагнитное состояние.

Соединение $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{CoO}_3$ исследовано методом нейтронной дифракции при тех же условиях, что и $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_{2.8}$. При комнатной температуре и атмосферном давлении данный кобальтит имеет ромбоэдрическую структуру с пространственной группой $\text{R}\bar{3}\text{c}$ и является парамагнетиком. При низких температурах и высоких давлениях не обнаружены изменения в кристаллической структуре, а так же появление магнитных рефлексов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-02-90051-Бел_а.

**Фазовое разделение сложных манганитов при половинном легировании
на примере организации $\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$**

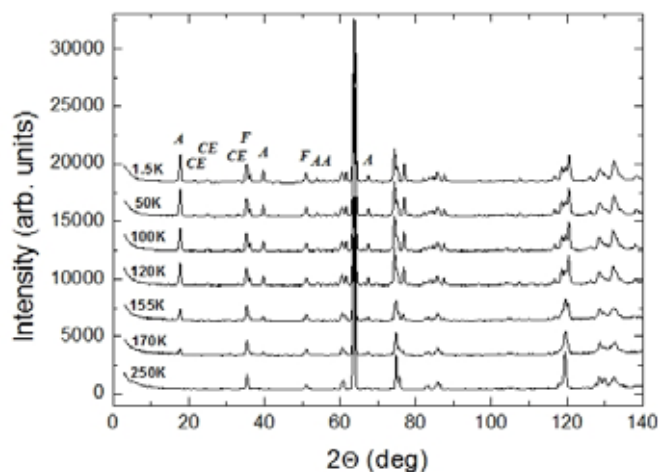
Г.В. Саранин¹, А.И. Курбаков^{1,2}, В.А. Рыжов², В.В. Рунов²,
С. Martin³, А. Maignan³

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

³ Laboratoire CRISMAT, Universite de Caen, Caen, France

Ранее, в итоге исследований соединений $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ было показано, что заменой Sm на Pr и обратно можно решительно изменить магнито-транспортные свойства манганитов. Различными методами проведено исследование фазового разделения и микроскопической природы магнитосопротивления в сложных манганитах при половинном легировании на примере $^{154}\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$. Обнаружено существование структурного фазового перехода при 170К от ромбической $Pbnt$ фазы к смеси двух фаз: ромбической $Pbnt$ и моноклинной $P2_1/m$ с теми же самыми позициями атомов в элементарной ячейке, но с разными параметрами решетки. Магнитное состояние исследуемого соединения при низких температурах представляет собой смесь трех магнитных фаз, образующихся при разных температурах: ферромагнитной ($T_C \sim 300\text{K}$), антиферромагнитной А-типа ($T_N^A \approx 170\text{K}$) и антиферромагнитной зарядоупорядоченной псевдо-СЕ-типа ($T_N^{CE} \approx 120\text{K}$), возникающих из-за сильной конкуренции между механизмами локализации и делокализации зарядов. F упорядочение формируется в районе комнатной температуры. Оно соответствует высокотемпературной слабдеформированной ромбической фазе, единственной, существующей при температурах начала F упорядочения. Оба антиферромагнитных состояния соответствуют моноклинной кристаллической структуре, сильно сжатой по оси c . В итоге описана микроскопическая природа магнитосопротивления, которое проявляется в понижении величины ρ на несколько порядков при приложении магнитного поля в 7 Тл.



**Высокотемпературные исследования монокристаллов системы
 $K_3H(SO_4)_2 - (NH_4)_3H(SO_4)_2 - H_2O$**

Е.В. Дмитричева, И.П. Макарова, В.В Гребенев, В.В. Долбина

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Одним из интересных и практически важных свойств кристаллов семейства $Me_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ ($Me = K, Rb, Cs, NH_4; X = S, Se, As, P$) [1] является протонная проводимость при относительно невысокой температуре, которая является структурно-обусловленным свойством и практически не зависит от влажности. Эти кристаллы представляют собой особый класс водородосодержащих соединений, в которых фазовые переходы (ФП) приводят к частичному или полному разупорядочению водородных связей. В результате происходит радикальное изменение физико-химических свойств кристаллов, и в том числе в них регистрируется появление протонной проводимости порядка $10^{-3} - 10^{-1} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Благодаря таким свойствам кристаллы этого семейства являются перспективными материалами для создания различных электрохимических устройств и активно исследуются на протяжении последних десятилетий.

В настоящей работе проведены поисковые исследования по выращиванию новых монокристаллов $(K_x(NH_4)_{1-x})_mH_n(SO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ в системе $K_3H(SO_4)_2 - (NH_4)_3H(SO_4)_2 - H_2O$, для крайних составов которой ранее было установлено наличие суперпротонных фазовых переходов [2] с принципиально различной кинетикой [3, 4]. С целью изучения влияния изоморфного замещения на кинетику ФП исследованы оптические, диэлектрические и тепловые свойства монокристаллов в интервале температур от 295 до 500 К и определена их кристаллическая структура при температуре 295 К.

В результате выполненных исследований для ряда образцов замещенных монокристаллов при повышении температуры зарегистрировано наличие структурных фазовых переходов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-02-92693) и ведущей научной школы (НШ-1130.2014.5) с использованием оборудования ЦКП "Структурная диагностика материалов" ИК РАН.

1. Баранов А.И. // Кристаллография (2003), 48(6), с.1081.
2. И.П. Макарова и др. // Кристаллография (2011), 56(6), с.1062.
3. A.I. Baranov et al. // Ferroelectrics, 2008, v.369, p.108 – 116.
4. R.H. Chen et al. // Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2000, v.61, p.1399–1406.

Локализованные и распространяющиеся возбуждения в спиновых жидкостях с разупорядоченными обманами

О.И. Утесов¹, А.В. Сизанов^{1,2}, А.В. Сыромятников^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

Даже небольшое количество дефектов может значительно изменить свойства твердых тел. Наиболее известные примеры – Андерсоновская локализация и эффект Кондо. Разупорядоченные системы взаимодействующих бозонов привлекают большое внимание в последнее время, в связи с появившейся возможностью изучать теоретические предсказания в этой области в разупорядоченных спиновых жидкостях и атомах в оптических решетках. Недавно было обнаружено, что димерные системы со спином $\frac{1}{2}$ и магнетики с целым спином и большой одноионной анизотропией типа легкая плоскость являются удобными объектами для изучения физики бозонных систем с дефектами. Беспорядок в таких веществах может быть обусловлен замещением атомов, участвующих в путях суперобменного взаимодействия, что приводит к беспорядку в константах обменных взаимодействий и анизотропии [1]. Этому типу беспорядка и посвящена данная работа.

Несмотря на значительный объем экспериментальных данных, существует совсем немного теоретических работ рассматривающих квантовые спиновые жидкости вдали от критических точек. В частности, в работе [2] численно исследовался двойной слой со спином $\frac{1}{2}$ и замороженным беспорядком. Мы предлагаем унифицированное рассмотрение спиновых систем со щелью и слабозадействующими бозонными элементарными возбуждениями, при наличии разупорядоченных обменов во всех трех пространственных измерениях. Нами использовалось стандартное приближение Т-матрицы [3] и численный анализ методом точной диагонализации гамильтониана системы.

Мы обнаружили, что приближение Т-матрицы применимо только к элементарным возбуждениям находящимся не слишком близко к краям зоны. Такие состояния остаются распространяющимися с конечным временем жизни, за счет рассеяния на дефектах. Для этих состояний нами были получены выражения для поправок к спектру и затухания в первом порядке по концентрации дефектов. Состояния же вблизи краев зоны, как показал численный анализ, становятся локализованными.

1. A. Zheludev and T. Roscilde, *C. R. Physique*, 14 (2013) 740.

2. M. Vojta, *Phys. Rev. Lett.*, 11 (2013) 097202.

3. Y. A. Izyumov and M. Medvedev, *Magnetically Ordered Crystals Containing Impurities* (Consultants Bureau, New York, 1973).

Исследование двумерных и квазидвумерных инвертированных фотонных кристаллов методами GISAXS и атомно-силовой микроскопии

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

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Пространственно-упорядоченные наносистемы обладают рядом уникальных свойств, которые могут лечь в основу новых приборов и материалов [0]. Особый интерес вызывают, так называемые, инвертированные опалоподобные структуры (ИОПС) в связи с возможными приложениями в спинтронике и перспективах использования данных материалов в устройствах сверхплотной записи и хранения информации [2]. Кроме того, данные структуры могут быть использованы в качестве модельных объектов для изучения магнитных возбуждений и распределения намагниченности в фрустрированных атомных системах [3]. Однако в связи со сложностью методов, которые используются для синтеза ИОПС, особую важность приобретает процесс аттестации и определения дефектности данных структур.

ИОПС могут быть получены из фотонных кристаллов посредством заполнения промежутков между сферами, из которых состоит фотонный кристалл, ферромагнитным веществом с последующим удалением самих сфер[4]. В данной работе с помощью GISAXS техники и атомно-силовой микроскопии (АСМ) были определены основные структурные свойства ИОПС на основе кобальта и никеля, имеющих толщины до 3.5 монослоев. Для однозначной интерпретации дифракционных картин было проведено моделирование GISAXS рассеяния. Выделено влияние форм-фактора структурного элемента ИОПС на результат рассеяния. Из анализа формы пиков был определен вид корреляционной функции и тип дефектов, наблюдаемых в двумерных и квазидвумерных ИОПС. Период и корреляционная длина ИОПС, полученные с помощью анализа фурье-образов АСМ изображений, находятся в хорошем согласии с результатами GISAXS измерений.

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

1. S. John, Phys. Rev. Lett., vol. 58, p. 2486–2489, (1987).
2. J. I. Martin, J. Nogues, et. al., J. of Magn. and Magn. Mat. 256(1), 449-501 (2003).
3. A. A. Mistonov, N. A. Grigoryeva, et. al., Phys. Rev. B, 87(22), 220408 (2013).
4. N. A. Grigoryeva, A. A. Mistonov, et. al., Phys. Rev. B, 84(6), 064405 (2011).

Исследование окисления тонкопленочной структуры Ti/FeCo методом комбинации рефлектометрии нейтронного и рентгеновского излучения

В.А. Матвеев¹, Н.К. Плешанов¹, В.И. Боднарчук², С.Н. Якунин³

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

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Исследования пленок титана толщиной 5-40 нм и тонкопленочных структур на их основе играют важную роль в разработке и получении поляризующих покрытий нейтронной оптики нового поколения. Такие покрытия позволят создавать инструментарий для эффективной работы с пучками холодных и ультрахолодных нейтронов [1-3].

В представленной работе проведено исследование окисления тонкопленочных систем Ti/FeCo, полученных путем магнетронного напыления на стеклянные подложки. Первым на стеклянную подложку напылялся слой FeCo толщиной 40 нм, который имитировал поляризующий слой оптического покрытия. Сверху наносился слой титана, толщина которого варьировалась в диапазоне от 5 до 40 нм. После напыления образец выдерживался в течение нескольких суток при комнатной температуре в атмосфере воздуха. За это время на поверхности образцов формировался оксидный слой, толщина и шероховатость которого определялись из данных нейтронной и рентгеновской рефлектометрии. При обработке экспериментальных данных использован комбинационный подход одновременной подгонки кривых коэффициента отражения нейтронного и рентгеновского излучения.

Результаты исследований показали, что на поверхности всех образцов формировался слой оксида толщиной 6.6 ± 0.5 нм. Такой результат заметно отличается от полученных ранее данных для случая окисления пленок Ti напыленных на стеклянную подложку. Толщина слоя оксида в этом случае зависела от исходной толщины титановой пленки и не превышала 4.9 ± 0.6 нм [4, 5]. Учитывая полученный результат, проведена оценка оптимальных параметров пленок титана для использования в поляризующих покрытиях нейтронной оптики.

1. N.K. Pleshanov. Nucl. Instrum. Methods A. 613, 15 (2010).
2. N.K. Pleshanov, A.P. Bulkin, V.G. Syromyatnikov. Nucl. Inst. Meth. A 634, 63 (2011).
3. N.K. Pleshanov J. of Phys.: Conf. Ser. 528, 012023 (2014).
4. V.A. Matveev, N.K. Pleshanov et al. J. of Surf. X-ray, Synchrotron and Neut. Tech. 8, 5 (2014).
5. О.В. Геращенко, В.А. Матвеев, и др. ФТТ. 7, 1386 (2014).

Исследование магнитных свойств Ho/Y сверхрешёток методом поляризованной нейтронной рефлектометрии и SQUID-магнитометрии

*В. Гарнавич¹, Д. Лотт², А. Волегов³, С. Матаух⁴, А. Воробьев⁵, А. Олешкевич⁵,
С. Григорьев^{1,6}*

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

²*Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

³*Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

⁴*Jülich Centre for Neutron Science, Garching, Germany*

⁵*Uppsala University, Uppsala, Sweden*

⁶*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Методом поляризованной нейтронной рефлектометрии (ПНР) и СКВИД-магнитометрии исследовано поведение магнитной структуры Ho/Y многослойной системы. В фокусе исследования - явление снятия вырождения киральной симметрии в спиновой геликоидальной структуре. Пять образцов с различной толщиной Ho- и Y-го слоёв были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии: [Ho_{45Å}/Y_{30Å}], [Ho_{25Å}/Y_{20Å}], [Ho_{20Å}/Y_{20Å}], [Ho_{60Å}/Y_{30Å}], [Ho_{25Å}/Y_{40Å}]. Снятие вырождения, обнаруженное методом ПНР, заключается в нарушении равновесия заселённости левых- и правых спиральных доменов при охлаждении образца ниже критической температуры Нееля (T_N) во внешнем магнитном поле, приложенном параллельно плоскости образца. Среднее значение киральности $\langle\gamma\rangle$ определяется как поляризационно-зависимая часть магнитного рассеяния нейтронов. Параметр $\langle\gamma\rangle$, достигавший значений 0.12 ± 0.01 при охлаждении образца в поле до 1 Тл для первых трёх образцов, для двух последних, напротив, сохраняет значение, близкое нулю. Результаты моделирования ПНР спектров дают возможность предположить, что слои гольмия Ho и иттрия Y расположены не строго параллельно подложке, а обладают волнообразным профилем, описываемым синусоидальной функцией. СКВИД-магнитометрия демонстрирует увеличение значения критических полей насыщения и подавление перехода в ферромагнитное состояние с понижением температуры (что так же подтверждается в ПНР экспериментах). Нарушение равновесия заселённости левых и правых спиралей, предположительно, связано с возникновением на границе раздела взаимодействия Дзялошинского-Мория.

Исследование неоднородных магнитных многослойных наноструктур поверхностным рассеянием рентгена и поляризованных нейтронов

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

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

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

³ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany*

⁴ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

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

Объектом исследования в данной работе являются многослойные магнитные гетероструктуры металл-диэлектрик (МД) / полупроводник (ПП), изготовленные в Воронежском Техническом Университете. В этих сложных неоднородных наноструктурах толщина и морфология слоёв, размеры и концентрация металлических наночастиц в диэлектрической матрице, играют ключевую роль в формировании электрических и магнитных свойств структуры в целом [1 -- 5]. В рамках представленной работы было проведено исследование серии образцов $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{(1-x)}/a\text{-Si:H}]_m$ в зависимости от концентрации x магнитного материала и толщины ПП слоёв взаимодополняющими методами рефлектометрии поляризованных нейтронов и малоуглового рассеяния рентгеновских лучей в скользящей геометрии. Показано, в образцах с концентрацией ферромагнетика выше порога перколяции, наблюдается неоднородное по толщине распределение намагниченности внутри одного МД слоя. Также, было исследовано упорядочение наночастиц металла в МД слоях в зависимости от толщины ПП прослойки. Для исследования были выбраны образцы с концентрацией ферромагнетика $x=35\%$ с различными толщинами ПП прослоек $d_{\text{Si}}=0.7$ нм, 1.5 нм и 2.3 нм. По картам малоуглового рассеяния синхротронного излучения в скользящей геометрии были определены средние расстояния между частицами в плоскости, толщины слоёв были определены из экспериментов по нейтронной рефлектометрии. На основании этих данных были получены средние размеры частиц и составлена модель трёхмерного распределения наночастиц в многослойной структуре, определяющая её магнитные свойства.

1. А. В. Иванов, Ю. Е. Калинин, В. Н. Нечаев и др., ФТТ 51, 2331 (2009).

2. И. В. Золотухин, Ю. Е. Калинин, П. В. Неретин, Альтернативная энергетика и экология 2, 7 (2002).

3. В. А. Белоусов, Ю. Е. Калинин, К. Г. Королев и др., Вестник ВГТУ 2, 24 (2006).

4. Е. А. Дядькина, А. А. Воробьёв, В. А. Уклеев и др., ЖЭТФ, 118, 3, 147 (2014).

5. E.A. Dyadkina, S.V. Grigoriev, D. Lott, A.V. Sitnikov, Y.E. Kalinin, Physica B: Condensed Matter, 406(12):2397–2400, 2011.

Эффекты близости в сверхрешетках Fe/Cr/Gd

М.В. Рябухина¹, Е.А. Кравцов¹, Д.В. Благодатков¹, Л.И. Наумова¹,
Ю.В. Никитенко², В.В. Проглядо¹, Ю.Н. Хайдуков³

¹ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Институт физики твёрдого тела общества Макса Планка, Штутгарт, Германия

Межслойное обменное взаимодействие в металлических магнитных сверхрешетках представляет большой физический интерес, как с точки зрения фундаментальной физики, так и для прикладных исследований. Особенности магнитного поведения сверхрешеток на основе 3d и 4f металлов сравнительно хорошо изучены (например, система FeGd), и имеется лишь несколько работ по взаимодействию этих магнитных металлов через немагнитную прослойку.

Известно, что при взаимодействии магнитных слоев Fe и Gd их моменты выстраиваются антипараллельно. При создании искусственной магнитной системы, состоящей из чередующихся наноразмерных слоев Fe, Cr и Gd, становится возможным управлять взаимной ориентацией магнитных моментов слоев Fe и Gd, выбрав нечетное количество монослоев Cr. Сложное магнитное состояние в пленках Fe/Cr/Gd определяется несколькими конкурирующими механизмами: увеличением магнитного момента Gd и его независимостью от температуры в интерфейсной области вблизи Fe, сильным антиферромагнитным взаимодействием Fe - Gd в области границ раздела, и зеемановским взаимодействием намагниченности с магнитным полем.

В настоящей работе мы обсуждаем применение метода поляризованной нейтронной (ПНР) и резонансной рентгеновской магнитной рефлектометрии (РРМР) для определения магнитной структуры внутри тонких ферромагнитных слоев.

Серия сверхрешеток Fe(35 Å)/Cr(t)/Gd(50 Å), $t = 0 - 60$ Å, была выращена методом магнетронного распыления на подложках (001)Si. Рентгеновские исследования проводились на станции 4-ID-D (APS, ANL), нейтронные – на установке NREX (FRM II) и REMUR (ОИЯИ). Из анализа измерений можно сказать, что в слое Gd формируется неоднородное магнитное состояние. Согласно спектрам ПНР данная структура слоистая и имеет антиферромагнитное упорядочение и величина магнитного момента слоев Gd существенно уменьшается с ростом температуры.

Работа поддержана грантами: РФФИ №14-22-01063_офи_м.

Применение синхротронного излучения для исследования динамики образования кристаллических фаз при горении нанопорошка алюминия в воздухе *in situ*

А.В. Мостовщиков, Е.В. Шинкевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Научный и практический интерес к нанопорошкам алюминия (НП Al) связан, в первую очередь, с перспективами их использования в ракетных топливах, в водородной энергетике, порошковой металлургии и других областях техники. В работе использовали НП Al, полученный с помощью электрического взрыва проводников в среде аргона. Образцы для исследования изготавливали путем компактированного нанопорошка алюминия в стальной пресс-форме при давлении 7,5 МПа. Исследование образцов проводили в ИЯФ СО РАН (г. Новосибирск) с помощью станции «Прецизионная дифрактометрия II» (канал СИ № 6 накопителя электронов ВЭПП-3), длина волны падающего излучения составляла 1,0731 Å. Образец помещали на рабочий стол дифрактометра. Синхротронное излучение фокусировали на поверхности образца, инициировали горение и проводили запись дифрактограмм, полученных от поверхности горящего компактированного нанопорошка алюминия [1].

В течение 8 секунд после инициирования горения интенсивность первоначально зарегистрированного 100% - рефлекса алюминия уменьшалась до величины ниже предела чувствительности детектора. Затем на поверхности образца в течение следующих 7 секунд вещества в твердой фазе не регистрировались. После этого практически одновременно с разбросом ± 2 секунды были обнаружены фазы γ -Al₂O₃ (3 рефлекса) и Al₅O₆N. Твердая фаза алюминия в продуктах сгорания нанопорошка была зарегистрирована спустя 5 секунд (1 рефлекс, $\sim 45^\circ$) и 10 секунд (2 рефлекса, $\sim 50^\circ$). Через 15 секунд от начала горения происходило формирование кристаллических фаз оксида и оксинитрида алюминия (Al₅O₆N). Формирование кристаллической фазы нитрида алюминия наблюдалось, примерно, через 22 секунды от начала горения. Следовательно, согласно проведенным исследованиям, механизм образования нитрида алюминия может быть представлен в виде схемы: $\text{НП Al} + \text{O}_2 \rightarrow \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 + \text{N}_2 \rightarrow \text{Al}_5\text{O}_6\text{N} + \text{N}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \text{AlN}$.

Таким образом, установлено, что при горении нанопорошка алюминия в воздухе формирование нитрида алюминия происходит через образование промежуточной фазы оксинитрида алюминия из γ -оксида алюминия, путем последовательного вытеснения атомов кислорода атомами азота воздуха.

1. А.П. Ильин, А.В. Мостовщиков, Н.А. Тимченко, Физика горения и взрыва, 49/3 (2013).

Структура и магнетизм многослойных наносистем на основе MgO

*Е.М. Якунина¹, В.И. Боднарчук², В.В. Проглядо¹, Е.А. Кравцов¹,
В. В. Устинов¹*

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Мультислойные наносистемы Fe/MgO/Fe, благодаря наблюдаемому в них эффекту туннельного магнетосопротивления (ГМС), представляют большой технологический и научный интерес, так как могут использоваться в качестве элементов устройств спинтроники. В настоящем докладе сообщается об исследованиях зависимости магнитных свойств ГМС систем Fe/MgO/Fe и Fe/MgO/Cr/MgO/Fe от толщины прослойки MgO.

Методом высоковакуумного магнетронного распыления были получены серии образцов MgO//Fe(200Å)/MgO(tÅ)/Fe(50Å)/Ta(50Å) и MgO//Fe(100Å)/MgO(tÅ)/Cr(nÅ)/MgO(tÅ)/Fe(70Å)/Ta(50Å). Толщина туннельного барьера MgO менялась в диапазоне t=0-25Å, используемая толщина прослойки Cr – n=9Å, 18Å. Структурные исследования, проведённые с помощью рентгеновской рефлектометрии, показали формирование высокосовершенной слоистой структуры и резких межслойных границ. Анализ данных, полученных при измерении намагниченности, выявил необычное магнитное поведение, обусловленное конкуренцией Зеемановского взаимодействия, межслойного обменного взаимодействия и магнитокристаллической анизотропии внутри слоёв Fe. Из магнитометрических данных следует, что слои Fe разной толщины в исследуемых структурах могут перемагничиваться в разных полях, что необходимо для реализации эффекта ГМС. Вывод о перемагничивании слоёв Fe подтверждается результатами измерений с использованием поляризационно-нейтронной рефлектометрии (REFLEX, ОИЯИ).

Работа поддержана грантами: РФФИ (грант № 14-02-00013, грант № 14-22-01063_офи_м) и НШ-1540.2014.2.

Real-time diffractometer на 6 канале реактора ИБР-2: текущее состояние

С.Г. Шеверев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Установка РТД (Real-time diffractometer) создана на базе дифрактометра ДН-2 на 6а канале реактора ИБР-2. РТД предназначен для исследований процессов в конденсированных средах *in situ* и в реальном времени методом когерентного рассеяния нейтронов. Помимо того РТД может использоваться как многофункциональный дифрактометр среднего разрешения – для изучения широкого спектра вопросов, связанных с фазовыми и магнитными переходами в моно- и поликристаллах, динамикой насыщения липидных мембран, уточнением параметров ячеек новых материалов.

В процессе модернизации была фундаментальным образом усовершенствована нейтронная система, расширена детекторная система, создано новое программное обеспечение для управления экспериментом.

За время тестовых измерений было получено достаточное количество данных о моно- и поликристаллических и биологических объектах.

В окончательной фазе модернизации предполагается еще более расширить детекторную систему установки, дополнить спектр оборудования, применяемого для создания условий на образце и усовершенствовать программное обеспечение для первичной обработки и управления экспериментом.

Нейтронородная система реактора ПИК

П.И. Коник^{1,2}, Е.В. Москвин^{1, 2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Строительство высокопоточного реактора ПИК в Гатчине находится на заключительном этапе. Планируется и ведется строительство до 50 нейтронных станций, многие из которых будут размещены в большом нейтронородном зале.

Нейтронородная система берет начало от двух каналов, ГЭК-2 и ГЭК-3. ГЭК-3 установлен на сферическом холодном источнике. ГЭК-2 оснащается холодным источником горизонтальной загрузки, имеющим цилиндрическую форму. Подобная конфигурация обеспечивает треугольное распределение расходимости на выходе канала, так что необходимо начинать все нейтронороды параллельно оси канала и лишь потом разводить их.

На канале ГЭК-2 выходным сечением 165×165 мм² предлагается установить 4 нейтронороды. Три из них имеют постоянное сечение и далее разделяются на отдельные ветви к приборам, использующим пучки с малой расходимостью. Четвертый нейтронород, имеющий баллистический профиль, обеспечит доставку сильно расходящихся в горизонтальной плоскости пучков до рефлектометра с вертикальной плоскостью рассеяния и установок СЭМУРН.

Нейтронороды канала ГЭК-3 планируются баллистическими по одному или двум направлениям в зависимости от требований конкретных приборов.

Ключевой идеей проекта является использование индивидуальных нейтронородов для каждого прибора. Только такие нейтронороды могут быть полностью оптимизированы для достижения максимального потока полезных нейтронов при минимальном фоне. В работе представлены результаты моделирования методом Монте-Карло и найденные оптимальные параметры для каждого нейтронорода.

**Текущий статус дифрактометра для исследований при
высоких давлениях ДН-6**

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

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Значительный прогресс в исследованиях при экстремальных условиях вызван открытием большого числа интересных новых явлений в физике конденсированного состояния, материаловедении, химии, геофизики. По сравнению с другими экспериментальными методами, воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого изменения некоторых физических свойств за счет изменения межатомных расстояний и углов. Однако применение методов нейтронной дифракции для исследований при высоком давлении крайне ограничено из-за довольно низкой интенсивности нейтронных источников, на много порядков меньшей по сравнению с источниками синхротронного излучения. Тем не менее, нейтронная дифракция обладает в сравнении с рентгеновской рядом преимуществ, заключающихся в возможности изучения кристаллической структуры материалов, содержащих легкие атомы, как водорода, так и кислорода и, особенно, изучения магнитной структуры материалов. Данное обстоятельство мотивирует развитие методики рассеяния нейтронов для исследования соединений в довольно широком диапазоне давлений (0-10 ГПа и выше).

Доклад посвящен текущему прогрессу методики нейтронной дифракции и методов исследования при экстремальных условиях на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2. Представлены последние результаты исследований сложных окислов марганца и железа при высоких давлениях до 20 ГПа, полученных в камерах высокого давления с использованием алмазных наковален. Обсуждаются перспективы для дальнейшего прогресса в разработке методов рассеяния нейтронов на реакторе ИБР-2 при экстремальных условиях.

Двухкоординатные сцинтилляционные детекторы нейтронов на основе твердотельных фотоумножителей и световодов

*В.С. Литвин¹, В.Н. Марин¹, С.Х. Караевский¹, А.П. Ивашкин¹,
Д.Н. Трунов¹, С.Н. Аксенов¹, А.А. Столяров¹, Р.А. Садыков^{1,2}*

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

² *Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Россия*

В последнее время активно ведется поиск альтернативы традиционным одно- и двухкоординатным детекторам нейтронов с гелиевым наполнением. Наиболее привлекательным направлением являются сцинтилляционные детекторы.

Нами разработаны одно- и двухкоординатные детекторы нейтронов на основе сцинтилляторов ZnS/LiF в виде пластин и твердотельных фотоумножителей (лавинных фотодиодов). Для сбора света используются массивы спектросмещающих волокон или световодов из органического стекла. Успешно испытаны прототипы детекторов в пучке нейтронов от образцового источника ²⁵²Са. Эффективность регистрации тепловых нейтронов может достигать 70%. Кадмиевое соотношение — не менее 10. Данные детекторы могут иметь координатное разрешение, соответствующее поперечному сечению световода, т.е. от 2 мм. Максимальная чувствительная площадь детекторов — до 0.2×0.2 м². За счет миниатюрных размеров фотоприемников данные детекторы могут стыковаться в системы с большой чувствительной площадью, в том числе изогнутые. Также возможно создание многослойных детекторов для увеличения эффективности.

Предложенные схемы позволят создать высокоэффективные, компактные и легкие (за счет использования твердотельных фотоумножителей), не требующие высоковольтного питания.

Порошковая дифракция со сканирующим двумерным детектором на источнике синхротронного излучения: первые результаты

Д.С. Молоденский¹, А.А. Гогин¹, С.Н. Сульянов²

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Первые экспериментальные порошковые данные для эталона LaV_6 получены на синхротронной станции РСА Курчатовского источника синхротронного излучения, установленной на пучке от 19-полюсного сверхпроводящего вигглера. Для фокусировки пучка была использована стандартная оптическая схема с двумя горизонтальными зеркалами и саггитально гнущимся вторым кристаллом монохроматора. Гониометр дифрактометра позволяет вращать двумерный 1024×1024 CCD детектор в вертикальной плоскости, что позволяет регистрировать углы дифракции вплоть до $2\theta = 160^\circ$. Угловое разрешение съёмки можно выбирать, изменяя расстояние образец-детектор вплоть до 1 метра.

Получен ряд двумерных дифракционных картин для разных углов поворота детектора от порошкового эталона, насыпанного в $200 \mu\text{m}$ стеклянный капилляр. Угловая повторяемость 2θ -оси вращения гониометра в автоматическом режиме была посчитана аппроксимацией порошковых пиков и составила $\Delta 2\theta = 0.001^\circ$. Полная зависимость $I(2\theta)$ может быть получена склейкой одномерных зависимостей, полученных из двумерных дифракционных картин для разных углов регистрации [1].

1. S. Sulyanov, H. Boysen, C. Paulmann, E. Sulyanova, A. Rusakov, Z. Kristallogr.Proc.1, 175-180 (2011).

Новый подход в обработке и интерпретации данных спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов

Е.Г. Яшина^{1,2}, С.В. Григорьев^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Спин-Эхо МУРН – новый метод исследования частиц мезо- и наномасштаба. В этом методе измеряется корреляционная функция частицы $G(z)$, которая является интегралом от закона рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{Q})$ по пространству переданных импульсов $\vec{Q} = (Q_y, Q_z)$ с весовой функцией $\cos(zQ_z)$ (z – спин-эхо длина) [1].

При анализе СЭМУРН данных эффективным оказывается подход, в котором делается предположение о функции, описывающей сечение малоуглового рассеяния нейтронов, а затем берется единственный интеграл. Сечение рассеяния можно легко интерпретировать, используя знания, накопленные при анализе данных МУРН.

В работе посчитаны корреляционные функции $G(z)$ для интерпретации СЭМУРН сигнала при рассеянии на следующих немагнитных и магнитных объектах:

1. Нефрактальный объект:

$$G(z) = \frac{\pi z}{2\xi} K_1\left(\frac{\pi z}{2\xi}\right), \quad (1)$$

где ξ – корреляционная длина, $K_1(x)$ — функция Макдональда первого порядка.

2. Фрактал, имеющий фрактальную размерность $D_m = 3$:

$$G(z) = \exp\left(-\left(\frac{z}{\xi}\right)\right). \quad (2)$$

3. Магнитные спирали:

$$G(z) = \cos(zk_z) \exp\left(-\left(\frac{z}{\xi}\right)^2\right), \quad (3)$$

где k_z - z-компонента вектора магнитной спирали.

Корреляционные функции, посчитанные таким образом, хорошо описывают экспериментальные кривые. Зная характер кривой, можно получить информацию об исследуемом объекте, например, характерный размер, фрактальную размерность, период магнитной спирали и проч.

1. T. Krouglov, I. M. de Schepper, W. G. Bouwman, M. Th. Rekveldt, J. Appl. Cryst. 36 (2003) 117–124.

2. Sergey V. Grigoriev, Theo M. Rekveldt, Timofey V. Krouglov, Wicher H. Kraan, Wim G. Bouwman, J. Appl. Cryst., 39 (2006) 252-258.

Различные приложения метода спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов для исследований конденсированных сред

Е.В. Величко^{1,2}, С.В. Григорьев^{1,2}

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

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

Метод спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов основан на явлении ларморовской прецессии нейтронов в магнитном поле. Особенности данного метода являются: высокая светосила, представление экспериментальных результатов в реальном пространстве и простота учета многократного рассеяния на образце.

В работе показаны результаты исследований широкого круга объектов методом СЭМУРН, среди них: опалоподобные структуры на основе SiO₂-микросфер (диаметрами 270, 320, 400, 500, 700 нм), неорганические фрактальные структуры на основе ZrO₂ и природного антрацита (объекты получены различными способами, благодаря чему обладают различными типами структур и фрактальными размерностями), ядра биологических клеток (эритроцитов кур и аденокарциномы линии HeLa), керамические функциональные материалы (твердотельные кислородпроводящие мембраны

на основе Bi_{12.8}Mg_{0.2}Mo₅O_{34±δ}) и геликоидальные магнетики

(поликристаллические образцы на основе MnGe).

Предложен новый подход к интерпретации и обработке данных, полученных методом СЭМУРН. В этом подходе делается предположение о функции, описывающей сечение малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$, а затем берется единственный интеграл (1). Сечение $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ можно легко интерпретировать, используя знания, накопленные при анализе данных МУРН.

$$G(z) = \frac{1}{k_0^2} \int \cos(zQ_z) \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) dQ_y dQ_z \quad (1)$$

Показано, что метод СЭМУРН наиболее эффективен для изучения объектов с размерами порядка 1 микрометра, т.е. в диапазоне недостижимом для МУРН. Этот факт указывает на комплементарность методов МУРН и СЭМУРН.

Исследование электронного строения фталоцианинов переходных металлов и пленочных структур на их основе

Г.И. Семушкина¹, Л.Н. Мазалов¹, Р.В. Гуляев², Т.В. Басова¹

¹ *Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия*

В последние два десятилетия наблюдается повышенный интерес исследователей к органическим материалам, которые могли бы быть использованы в качестве альтернативы современным полупроводникам в целом ряде практических приложений. Примером этому могут служить пленочные материалы на основе комплексов фталоцианинов (MPc), которые в настоящее время используются в качестве элементной базы в ряде микроэлектронных устройств (элементы солнечных батарей, газовые сенсоры, транзисторы и др.).

Одним из важнейших факторов, учитываемых при отборе веществ с целью создания электронных и сенсорных устройств, является энергетическое положение и атомный состав верхних занятых молекулярных орбиталей (ВЗМО) и нижних свободных молекулярных орбиталей (НСМО) данных соединений.

Настоящая работа посвящена исследованию строения ВЗМО и НСМО незамещенных и гексадекафторзамещенных фталоцианинов переходных металлов ($M = Co, Cu, Zn$) и пленочных структур на основе медь-содержащих фталоцианинов с применением электродных подложек (ITO, Si). Анализ электронного строения соответствующих объектов проводился экспериментально - методами рентгеновской и рентгено-электронной спектроскопий, а также теоретически – методом теории функционала. Такой комплексный подход позволил определить порядок следования занятых и свободных уровней, энергетическое положение ВЗМО и НСМО, парциальный состав МО и характер связи металл-лиганд исследуемых соединений. Рассмотрено влияние природы металлоцентра и заместителей во фталоцианиновом лиганде на строение граничных МО. Установлено, что строение ВЗМО для MPc зависит от природы металла: ВЗМО CuPc и CoPc построены с вкладом $3d_{xy}$ -АО металла, $2p_x$ -, $2p_y$ -АО атомов углерода и $2p_x$ -, $2p_y$ -АО атомов азота. Граничные ВЗМО ZnPc включают $3d_{xy}$ -АО цинка и $2p_x$ -, $2p_y$ -АО атомов азота. Граничные НСМО для CuPc, CoPc и их фторзамещенных аналогов, построены, в основном, из $3d$ -АО металла. Определено, что осаждение фталоцианина меди на Si-подложку не приводит к существенному изменению электронной структуры фталоцианина, тогда как в случае CuPc/ITO обнаружено изменение распределения электронной плотности на атоме металла фталоцианина меди, что возможно связано с диффундированием кислорода, находящегося в ITO-пленке, во внутрь органического материала.

Исследование влияние электронного и нейтронного облучения на монокристаллы корунда с применением синхротронного излучения

Э.М. Александян¹, В.В. Арутюнян¹, В.С. Багдасарян¹, А.А. Саакян¹, В.Н. Махов²

¹Национальная научная лаборатория (ЕрФИ), Ереван, Армения

²Физический институт, Москва, Россия

Электронная структура и механические свойства монокристаллов корунда ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) всегда являлись объектом внимания многих исследователей ввиду той роли, которую играет этот материал в различных приложениях - оборудование для ускорителей [1], электронные устройства [2], ювелирные изделия [3], оптические среды и т.д. Эксплуатационные показатели данного материала во всех этих приложениях зависят от его качества, в особенности от концентрации ростовых и радиационных дефектов. Поэтому важным моментом является исследование оптических характеристик радиационных дефектов в корунде.

В настоящей работе исследуются влияние электронного и нейтронного облучения на возникновение радиационных дефектов, проводится сравнение образцов корунда до и после влияния различного вида излучения.

Объектами исследования являются номинально чистые монокристаллы корунда, выращенные методом горизонтальной направленной кристаллизации (ГНК) и методом Вернейля. Монокристаллы корунда были облучены электронами с энергией 50 МэВ и дозой $1.2 \cdot 10^{17} - 10^{18}$ эл/см² и нейтронами с энергией - 2 МэВ и дозой 10^{18} н/см. Исследование люминесценции с временным разрешением в видимом и ВУФ диапазоне (4-25 эВ) под воздействием синхротронного излучения (СИ) при температуре 9-300 К проводились на установке SUPERLUMI (HASYLAB в DESY) [4], и под воздействием мягкого СИ рентгена - на электронном синхротроне С-60 в Физическом институте им. П.Н. Лебедева (Москва) [5].

Возбуждение нейтронами с энергией 2 МэВ приводит к эффективному образованию F^+ центров в кристалле корунда, что выражается в интенсивной люминесценции полосы 325 нм. Кристаллы, выращенные методом Вернейля и ГНК, имеют разную интенсивность люминесценции, которая обусловлена начальной концентрацией дефектов и ее изменением в результате облучения электронами с энергией 50 МэВ при различных дозах.

1. Y. Aoki, N.T. My, S. Yamamoto, H. Naramoto, NIM B 114, 276-280, (1996).
2. S.M. Sze, Physics of Semiconductors Devices, Wiley, New York, (1969).
3. T. Calligaro, J.-P. Poirot, G. Querre, NIM B 150, 628-634, (1999).
4. G. Zimmerer, Radiation Measurements, vol. 42, 859 – 864, (2007).
5. V.N. Makhov, S.B. Dabagov, N.Yu. Kirikova, V.A. Murashova, R.V. Fedorchuk, M.N. Yakimenko, Proc. of SPIE, vol. 3766, 406-409, (1999).

Parameters of the NERA spectrometer at the IBR-2 pulse reactor.

D. Chudoba^{1,2}, Ł. Hetmańczyk^{1,3}, I. Natkaniec^{1,2}, I.L. Sashin¹

¹Joint Institute for Nuclear Research, FLNP, Dubna, Russian Federation

²Adam Mickiewicz University, Faculty of Physics, Poznań, Poland

³Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Kraków, Poland

The inverted geometry time-of-flight spectrometer NERA for a simultaneous investigation of elastic and inelastic neutron scattering was constructed on a hundred-meter-long flight path of the IBR-2 reactor at JINR, Dubna, Russia. Spectrometer parameters were optimized for the thermal neutron spectrum of a water moderator at 330 K. Recently, a new type of cold neutron source operating at 30 K was installed in the sector of six horizontal channels.

The main objectives of the modernization program of the NERA spectrometer (replacement of the 100-m neutron guide) were realized, and after modernization of the IBR-2 core the spectrometer was commissioned in September, 2012. The cold source in complex with water moderator allows one to effectively use incident neutrons in wide range of the wavelengths. Nevertheless, the transmission of the new bent Ni-mirror guide limits the wavelength of thermal neutrons to about $\lambda = 0.8 \text{ \AA}$. The neutron energy transfer for inelastic neutron scattering (INS) spectra is then limited to 120 meV (1000 cm^{-1}). The gain factor (years 2012/2005) for the water moderator regarding the average thermal neutron flux at the sample position is 1.2, which is not as high as expected. On the other hand, the commissioning of cold moderator significantly changed the spectral distribution of incident neutrons. The gain factor water moderator/cold moderator in the range of wavelength $2 \text{ \AA} < \lambda < 7 \text{ \AA}$ increases to between 1 and 7. This provides much better conditions for measurements of neutron powder diffraction (NPD), low energy part of the (INS) spectra (up to 20 meV) and quasielastic neutron scattering (QENS) spectra in a high resolution mode with near back-scattering crystal analyzers.

The proposals for further modernization of spectrometer NERA (increasing luminosity and resolution enhancement) are discussed.

Some unconventional neutron diffractometer performances - particular properties

P. Mikula¹, M. Vrana¹, B.S. Seong², W. Woo², V.T. Em³

¹ Nuclear Physics Institute, ASCR, Rez, Czech Republic,

² Neutron Science Division, KAERI, Daejeon, Yuseong-gu, Republic of Korea,

³ National Research Centre «Kurchatov Institute», Moscow, Russian Federation

Introduction

Bent perfect crystals (BPC) have appeared in the last two decades as an excellent alternative of mosaic crystals in neutron diffractometry or spectrometry when employing them as monochromators or analyzers. Namely, their focusing and reflectivity properties and the possibility of their manipulation in favour of optimizing luminosity and resolution of the scattering instruments are attractive. Therefore, a permanent attention is paid to their further effective employment.

Content of the contribution

In our contribution we present particular properties of a special neutron diffractometer performances employing bent perfect crystals as:

- A monochromator operating at small take off angle [1]
- A double-crystal (DC) monochromator employing bent perfect crystals of Si in (1,-1) and (n,-m) settings
- A double-crystal (DC) monochromator employing bent perfect crystals of Si in (n,-m) settings with the second crystal in the fully asymmetric diffraction geometry [2].

It has been found that by using quasi parallel or quasi dispersive (n,-m) settings, the related instruments provided excellent real space focusing with the spot of 1 mm or less, angular resolution $\Delta\theta \approx 10^{-3}$ rad and sufficiently high luminosity. A highly correlated monochromatic beam shows a high level of spatial coherence permitting to study refraction effects on edges often used in phase-contrast radiography.

Conclusion

It has been found that besides an excellent focusing and reflectivity properties of the presented bent perfect crystal settings the obtained monochromatic neutron current is sufficiently high for diffraction experiments even at the medium power research reactors. At present the BPC elements can be mostly found in the instruments dedicated to residual strain/stress scanning, powder diffractometry, inelastic scattering, neutron imaging and high resolution SANS.

1. B.S. Seong, V. Em, P. Mikula et al., Materials Sc. Forum 681 426 (2011).

2. P. Mikula, M. Vrana, et al., J. Appl. Cryst. 47 599 (2014).

Исследование магнитной многослойной Co/Fe наноструктуры методом нейтронной рефлектометрии

Чжоу Зо Лин¹, В.Г. Сыромятников^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Интерес к магнитным многослойным наноструктурам не ослабевает на протяжении последних десятилетий. В частности, он обусловлен использованием таких структур в исследовательских нейтронно-физических установках в качестве нейтронно-оптических элементов.

В данной работе представлены результаты исследований магнитной многослойной периодической Co/Fe наноструктуры методом нейтронной рефлектометрии. Измерения проведены на нейтронном рефлектометре НР-4М (реактор ВВР-М, ПИЯФ НИЦ КИ) по время-пролетной методике. В работе приведены экспериментальные и теоретические коэффициенты отражения нейтронного пучка от многослойной магнитной Co/Fe наноструктуры в зависимости от переданного импульса для нескольких величин магнитного поля и для обеих спиновых компонент пучка. Установлено и подтверждено расчетом, что коэффициенты отражения первых брэгговских пиков для исследуемой Co/Fe наноструктуры для обеих спиновых компонент пучка практически равны друг другу и слабо зависят от магнитного поля.

Ренормировка спектра спиновых волн в трехмерном антиферромагнетике с дипольным взаимодействием

Л.А. Баталов¹, А.В. Сыромятников^{1, 2}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

Концепция элементарных возбуждений это один из самых мощных инструментов при рассмотрении низкоэнергетических свойств многочастичных систем [1]. Согласно этой концепции, каждое слабозвозбуждённое состояние системы может быть представлено как набор слабозвзаимодействующих частиц, переносящих поределённый импульс и квант энергии. Элементарные возбуждения, будучи устойчивыми волновыми пакетами, имеют конечное время жизни (или затухание), которое интерпретируется обычно как следствие спонтанного распада и взаимодействия между ними. По этой концепции, квазичастицы хорошо определены (из затухание гораздо меньше их энергии).

В докладе обсуждается трехмерный антиферромагнетик Гейзенберга с дипольными силами при температуре много меньшей критической. В рамках $1/S$ - разложения наблюдаются довольно неожиданные явления: щель в спектре и аномально большое затухание.

Природа возникновения щели, пропорциональной характерной энергии дипольных сил, лежит в явлениях типа “порядок из беспорядка”. Вырожденность классического основного состояния снимается квантовыми или термическими флуктуациями, делая ребро куба легким направлением и приводя к щели.

Также дипольные силы снимают двойную вырожденность спектра антиферромагнетика. Именно расщепления спектра на две ветви приводит к затуханию при конечной температуре. Для квантового случая затухание, пропорциональное четвёртой степени температуры, относительно мало, но его можно увеличить посредством включения внешнего поля или, для кристалла $TlMn1-xCoxF3$, уменьшить щель путём изменения x [2].

Отметим, что похожие эффекты для длинноволновых магнонов были получены для кубического ферромагнетика с дипольными силами [3,4]. К сожалению, экспериментальная проверка наших предсказаний сложна ввиду малой доли сильно затухающих магнонов.

1. A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics (Dover, New York, 1963).

2. D.E. Eastman et al., J. Appl. Phys. 38, 5209 (1967).

3. A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B 77, 144433 (2008).

4. A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B 82, 024432 (2010).

Исследование кристаллической и магнитной структуры лантан-стронциевых манганитов при высоком давлении

*Н.М. Белозерова^{1,2}, Д.П. Козленко², С.Е. Кичанов², Z. Jirak³, Е.В. Лукин²,
Б.Н. Савенко²*

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Институт физики, Прага, Чешская республика*

Перовскитоподобные манганиты $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ проявляют большое разнообразие свойств в зависимости степени легирования x . Сильная корреляция между различными физическими свойствами манганитов приводит к высокой чувствительности таких соединений к изменению внешних условий: температуры, внешних магнитных и электрических полей, давления.

По сравнению с другими экспериментальными методами, воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого изменения магнитных взаимодействий за счет вариации межатомных расстояний и углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, что необходимо для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в манганитах.

Исследование кристаллической и магнитной структуры манганитов было проведено методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна), с использованием камеры высокого давления с сапфировыми наковальнями, в диапазоне давлений до 5.7 ГПа и температурном диапазоне 4-300К. Изучались образцы $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ со степенью легирования $x=0.37$ и 0.28 . Обработка и анализ экспериментальных данных проводились методом Ритвельда с помощью программы FullProf.

Как результат, в соединениях $\text{La}_{0.63}\text{Sr}_{0.37}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0.72}\text{Sr}_{0.28}\text{MnO}_3$ был обнаружен переход из ферромагнитного (ФМ) в антиферромагнитное (АФМ) состояние при высоком давлении. Наблюдаемые магнитные фазовые переходы сопровождаются структурными переходами из первоначального состояния с пр. гр. $R\bar{3}c$ в состояние с пр. гр. $Pnma$. Так же в манганитах $\text{La}_{0.63}\text{Sr}_{0.37}\text{MnO}_3$ при нормальном давлении и температуре 4К наблюдалось наличие АФМ фазы. Получены барические зависимости параметров элементарной ячейки и объема, магнитного момента ферромагнитной и антиферромагнитной фазы.

Моделирование отражения нейтронов рассеяния от многослойных структур с учетом шероховатости в кинематическом приближении

А.В. Белушкин¹, С.А. Маношин¹, П.В. Зрелов², В.С. Рихвицкий²

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

²*Объединенный институт ядерных исследований, ЛИТ, Дубна, Россия*

Проблема учета шероховатости поверхностей при моделировании отражения нейтронов от многослойных наноструктур рассматривалась в ряде публикаций. Наиболее строгий подход в рамках DWBA был предложен в [1]. Однако строгий квантовомеханический анализ зачастую достаточно сложно реализовать, особенно в случаях сложных систем, требующих для своего моделирования большого числа варьируемых параметров. Альтернативным подходом служит кинематическое (Борновское) приближение. Известно, что данное приближение неприменимо для описания отражения нейтронов вблизи угла полного внешнего отражения. Поэтому вместо него часто используется рекурсивный алгоритм Парратта [2].

В докладе будет представлено моделирование отражения нейтронов рассеяния от тонких шероховатых или гладких пленок на подложке. Для генерации трехмерных шероховатых поверхностей был разработан специальный алгоритм, использующий аппарат автокорреляционных функций с Фурье преобразованием, известный из теории случайных процессов [3]. Алгоритм позволяет смоделировать шероховатость с заданными характеристиками. Моделирование проведено для отражения от оксида кремния с абсолютно гладкой поверхностью и для различных величин шероховатости. Затем моделировалась пленка никеля на поверхности оксида кремния. Параметры пленки и различные виды шероховатости (абсолютно гладкая подложка и шероховатая поверхность пленки, полностью коррелированные шероховатости подложки и пленки и некоррелированные шероховатости подложки и поверхности пленки) были такими же, как рассмотрено в работе [1]. Рефлектометрический эксперимент моделировался в приближении Парратта, GISANS рассматривался в кинематическом приближении. Произведено сравнение с ранее полученными результатами [1]. Анализируются возможности и ограничения данного подхода для моделирования магнитной шероховатости и для анализа сложных многокомпонентных слоистых наноструктур с различными типами неоднородностей.

1. Roger Pynn, Neutron scattering by rough surfaces at grazing incidence, Phys. Rev B 45/2 602 (1992).
2. L.G. Parratt, Surface studies of solids by total reflection of x-rays, Phys. Rev. 95 359 (1954).
3. Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И., Введение в статистическую радиофизику. Часть 2. Случайные поля, М, Наука, 2-е издание, 1978.

Neutron diffraction study of substitution and size effects on the structure of 5 V spinel cathode materials $\text{LiNi}_{0.5-x}\text{Mn}_{1.5-y}\text{M}_{x+y}\text{O}_4$

*I.A. Bobrikov¹, I.D. Karpov¹, N.V. Kosova²,
E.T. Devyatkina², O.A. Podgornova², A.M. Balagurov¹*

²*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

¹*Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia*

$\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ is the most promising amongst 5V cathode materials for lithium-ion batteries due to two-electron process $\text{Ni}^{2+/4+}$ and a flat plateau at 4.7 V. Two crystal types of $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ can be formed depending on the synthetic conditions: primitive cubic spinel with space group $\text{P4}_3\text{32}$ and 3d cation ordering formed at $T < 700^\circ\text{C}$ and face-centered spinel with space group Fd3m and statistical distribution of 3d cations formed at $T > 800^\circ\text{C}$. $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ ($\text{P4}_3\text{32}$) shows poorer electrochemical behavior than $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_{4-\delta}$ (Fd3m) which mainly is due to the structural transformations during cycling. The goal of the present work was to study the substitution and size effect on the structure and electrochemistry of $\text{LiNi}_{0.5-x}\text{Mn}_{1.5-y}\text{M}_{x+y}\text{O}_4$ ($\text{M}=\text{Co}, \text{Cr}, \text{Ti}, \text{Al}, \text{Mg}$; $x+y=0.05$) prepared by mechanochemically assisted solid state synthesis at different temperatures. Since XRD cannot provide complete information about cation distribution in the structure of $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ because of low scattering ability of lithium atoms and close resemblance of the Mn and Ni X-ray atomic form factors, the neutron powder diffraction (NPD) has been used. NPD spectra were obtained on the High Resolution Fourier Diffractometer (HRFD) at the IBR-2 pulsed reactor Dubna. According to Rietveld refined NPD spectra, the structure of spinels-800 is well described with Fd3m s.g. On contrary, spinels-700 are two-phase materials: the $\text{P4}_3\text{32}$ phase content is 5-20 % vs. substitution ion. Cell parameter a varies from 8.17 to 8.18 Å. It has been found that the substitution ions preferably occupy Ni sites. The average size of coherent blocks is 70-80 nm for spinels-700 and 100-150 nm for spinels-800, while crystalline microstrain changes in the opposite way. Two-phase structure of the samples well correlates with two couples of redox peaks on the $dQ/dU=f(U)$ plots. Cr, Co and Ti substituted spinels show the highest capacity (~120 mA h/g) and the best electrochemical performance. Thus, mechanochemically assisted synthesis of doped $\text{LiNi}_{0.5-x}\text{Mn}_{1.5-y}\text{M}_{x+y}\text{O}_4$ spinels allows to decrease the annealing temperature and to prepare nanosized materials with suitable structure (Fd3m) and promising electrochemistry. This work was supported by Russian Foundation for Basic Research (the RFBR project №14-02-31506).

Проблемы описания разрешения нейтронных дифрактометров

В.И. Бобровский

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Развитие методов теоретического описания аппаратурных эффектов в порошковых нейтронных дифрактометрах важно как для анализа экспериментальных результатов и учета аппаратурных вкладов, так и для оптимизации существующих и разработки новых конструкций нейтронных дифрактометров. Использование для решения этой задачи аналитических методов в отличие от численного моделирования приборов позволяет не только понимать качественную сторону наблюдаемых эффектов, но и осознанно их учитывать. Однако корректное непротиворечивое аналитическое описание этих приборов требует включения в рассмотрение пространственных эффектов, обычно опускаемых для упрощения и связанных с неоднородностью и изменением характеристик нейтронного пучка по поперечному сечению при его прохождении по тракту дифрактометра. Нами показано, что в противном случае описывающие прибор формулы могут не только вести к ошибкам, например, при определении по экспериментальным данным его эффективных параметров, но и противоречить правилам сохранения интегральных характеристик потоков. При использовании математически корректного подхода и с учетом пространственных эффектов нам удалось дать универсальное описание дифрактометров разнообразных конструкций, включая случаи одинарных и двойных монохроматоров (фокусирующих и плоских), а на его основе получить формулы для аппаратурных вкладов в форму линии брэгговских пиков [1-3]. Исследование структуры этих выражений позволило выявить ряд геометрических эффектов, касающихся проблем фокусировки и коллимации нейтронных пучков, а также установить некоторые ограничения предположений, используемых в популярных симуляционных программных пакетах. Приводится обзор результатов, полученных в цикле работ по данной тематике.

Работа выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» по теме ИФМ УрО РАН «Поток» при частичной финансовой поддержке Проекта ОФН РАН № 12-Т-2-1006.

1. В.И.Бобровский. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2010, No.2, pp. 5-13.
2. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, № 11, с. 5–13.
3. V.I. Bobrovskii. Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2013, Volume 7, Issue 6, pp 1254-1260.

Влияние микроволнового излучения на формирование наночастиц диоксида марганца

О.В. Бойцова^{1, 2}

¹ *Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет, Москва, Россия*

Последние несколько лет остро возрос интерес к химическим реакциям, протекающим в условиях микроволнового облучения. Благодаря успехам в области инженерии микроволновых реакторов появилась возможность проводить высоко чувствительные ко внешним факторам реакции одинаково качественно как на лабораторном уровне, так и в реальных условиях. Микроволновая химия стремительно развивается, но за ее пределами остаются вопросы о физическом описании микроволнового воздействия с веществом, проблемах проведения реакций на подложках. Одной из наиболее известных химических систем, обладающих низкой стоимостью и малой токсичностью, является система Mn-O и, в частности, многокомпонентные материалы на основе диоксида марганца (MnO₂) Кристаллохимия диоксида марганца достаточно сложна, разнообразна, высоко чувствительна к химическому составу и условиям получения многокомпонентных фаз, что делает материалы на его основе уникальными объектами исследования. К сожалению, крайне малоизученными остаются вопросы, связанные с детальным изучением фазовых соотношений в системах с матрицей MnO₂. В частности, результаты, полученные разными авторами, плохо воспроизводимы, а сами зависимости структуры и морфологии для различных кристаллических форм носят приближенный, часто – описательный характер. В ходе данной работы были получены в гидротермальных условиях при участии микроволнового излучения наночастицы MnO₂ в виде пиролюзита и рамсделита. β-MnO₂. Изучены взаимосвязь морфологии и кристаллической ориентации полученных материалов. Также выявлено превращение плоских частиц β-MnO₂ (pyrolusite) в нитевидные γ-MnO₂ (ramsdellite) при добавлении Fe(3+). Установлено влияние температурно-временных параметров синтеза и кислотности среды на морфологию получаемых наночастиц.

Проект выполнен при поддержке РФФИ № 14-29-04100

Поиск ЭДМ нейтрона кристалл-дифракционным методом

*Ю.П. Брагинец^{1,2}, В.В. Воронин^{1,2,3}, Е.О. Везжлев^{1,2}, И.А. Кузнецов¹,
Е.Г. Лапин¹, М.В. Ласица^{1,2}, С.Ю. Семенихин¹, В.В. Федоров^{1,2,3}*

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

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

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

В работе обсуждается эксперимент по поиску электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона с использованием дифракции в нецентросимметричном кристалле. Основное преимущество данного метода заключается в огромной величине внутрикристаллического электрического поля, возникающего при прохождении нейтрона через нецентросимметричный кристалл. В частности, в кристалле кварца величина поля может достигать $2 \cdot 10^8$ В/см [1].

Для исследования статистической и систематической точности данного метода, был проведен тестовый эксперимент. Полученная оценка на ЭДМ составила $d_n = (2.5 \pm 6.5_{\text{stat}} \pm 5.5_{\text{syst}}) 10^{-24}$ е·см [2, 3]. Чувствительность к ЭДМ в тестовом эксперименте $1,6 \cdot 10^{-23}$ е·см/сутки. С помощью пакета Vitess было проведено компьютерное моделирование данного эксперимента. Результаты данного модельного расчета показали, что чувствительность полномасштабной экспериментальной установки при использовании кристалла кварца длиной 50 см с отражающей плоскостью (110), которая сейчас находится в стадии изготовления, может быть увеличена в 60 раз по сравнению с тестовым экспериментом и составит $\sim (2 \div 3) \cdot 10^{-25}$ е·см/сутки. Дальнейшее улучшение чувствительности в несколько раз может быть связано с использованием специальной системы анализа поляризации, адаптированной для данной установки. Также рассматривается возможность использования других нецентросимметричных кристаллов (типа BSO) в накопительном варианте установки, в которой время пребывания нейтрона внутри кристалла увеличивают за счет многократного прохождения нейтрона через один и тот же кристалл.

1. Алексеев В.Л., Воронин В.В., Лапин Е.Г., Леушкин Е.К., Румянцев В.Л., Сумбаев О.И., Федоров В.В., ЖЭТФ 96, 1921 (1989).

2. V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, E. Leli`evre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, F. Tasset, V.V. Voronin, Yu.P. Braginetz, Nucl. Phys. A 827, 538 (2009).

3. V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, E. Leli`evre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, V.V. Voronin, Yu.P. Braginetz, Physics Letters B 694, 22 (2010).

Магнитообъёмные эффекты и влияние давления на магнитные свойства в соединении $\text{Ho}(\text{Co}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2$.

Э.З. Валиев, А.Е. Теплых

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Среди интерметаллических соединений редкоземельных элементов (R) с 3d переходными металлами, соединения RCo_2 особенно интересны. Кроме больших магнитообъёмных эффектов эти соединения проявляют ряд характерных свойств, делающих их подходящими объектами для проверки различных физических теорий. Так первоначально для объяснения магнитного фазового перехода первого рода в ряду RCo_2 (R=Er, Ho, Dy) была использована теория метамагнетизма коллективизированных электронов[1].

В настоящей работе мы провели нейтронографическое исследование соединения $\text{Ho}(\text{Co}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2$ в интервале температур 5-300 К, с целью определения величины магнитных моментов кобальта и гольмия их температурной зависимости и влияния давления на их величину. Также была измерена температурная зависимость постоянной решетки этого соединения и определена величина спонтанной объёмной магнитострикции при давлении $p = 0$ и $p = 5$ кбар.

На основе предложенной нами [2], обменно-стрикционной модели ферримагнетика, проведен расчет температурной намагниченности подрешеток Ho и Co и температурной зависимости постоянной решетки соединения $\text{Ho}(\text{Co}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2$. Определены численные значения параметров обменного взаимодействия между парами атомов этого соединения и величина постоянной магнитоупругого взаимодействия.

Подтверждена предложенная ранее иерархия величины обменных взаимодействий в соединениях RCo_2 : $I_{\text{Co-Co}} \gg |I_{\text{R-Co}}| \gg I_{\text{RR}}$. Показано, что модель локальных магнитных моментов для ферримагнетика с сильной зависимостью параметра обменного взаимодействия $I_{\text{Co-Co}}$ от межатомного расстояния позволяет удовлетворительно количественно объяснить величину магнитообъёмного эффекта, зависимость T_C от давления и температурную зависимость намагниченности подрешеток в соединении $\text{Ho}(\text{Co}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2$.

Работа выполнена с использованием УНУ «ИВВ-2М НМК ИФМ» по теме Института «Поток» при частичной финансовой поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН «Квантовые макрофизика и нелинейная динамика» (проект № 12-П-2-1019).

1. Inoe J. and Shimizu M., J. Phys.F: Met.Phys.1811 ,v.12, (1982).
2. Э.З. Валиев, ФММ ,5, т.96, (2003).

**Высокотемпературная нейтронография и анализ методом тайлинга
геометрических особенностей структуры соединений $RbMO_2$
($M = Al, Ga, Fe$): корреляция структура – проводимость**

*В.И. Воронин¹, И.Ф. Бергер^{1,2}, Н.В. Проскурнина¹, Г.Ш. Шехтман³,
В.А. Блатов⁴*

¹ *Институт физики металлов, УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

³ *Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

⁴ *Самарский государственный университет, Самара, Россия*

Природа высокой проводимости является одним из важнейших вопросов физики и химии твердых электролитов (ТЭЛ). Предполагается, что высокая проводимость ТЭЛ обусловлена аномально быстрой одно-, двух- или трехмерной диффузией определенного сорта ионов, которая носит кооперативный характер благодаря геометрическим особенностям структуры.

Методом высокотемпературной нейтронографии в интервале температур 23-580°C исследована кристаллическая структура соединений $RbMO_2$ ($M=Al, Ga, Fe$), имеющих высокую рубидий-катионную проводимость. При комнатной температуре они имеют орторомбическую решетку. В этой структуре методом компьютерного моделирования в программе TOPOS [1] были найдены пять сквозных каналов миграции катионов рубидия. Однако лишь канал, проходящий вдоль оси a и имеющий максимальное сечение, дает основной вклад в проводимость данных соединений. Т.е. проводимость в низкотемпературных фазах сильно анизотропна. С повышением температуры сечения каналов увеличиваются, обеспечивая рост катионной проводимости. При высоких температурах в $RbGaO_2$ и $RbFeO_2$ происходит фазовый переход из орторомбической в кубическую структуру. При этом сечения всех каналов проводимости выравниваются, скачкообразно увеличиваясь, и проводимость становится трехмерной. При температуре фазового перехода наблюдается излом в Аррениусовских кривых, свидетельствующих о скачкообразном уменьшении энергии активации.

Таким образом, выполненные исследования показали отчетливую корреляцию между сечением сквозных каналов и ростом электропроводности.

Работа выполнена с использованием УНУ «ИВВ-2М НМК ИФМ» по теме Института «Поток» при частичной финансовой поддержке Проекта № 12-Т-2-1006 УрО РАН.

1. N.A.Anurova, V.A.Blatov, G.D.Ilyushin, O.A.Blatova, A.K.Ivanov-Schits, L.N.Dem'yanets, Solid State Ionics, 179 (2008) 2248.

**Расчет плотности дислокаций холоднодеформированной меди
из дифракционных нейтронографических данных**

В.И. Воронин¹, И.Ф. Бергер^{1, 2}, Э.З. Валиев¹

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Реальное состояние холоднодеформированных материалов определяется, во многом, величиной и типом дислокационной структуры. Прямым методом наблюдения дислокаций является электронная микроскопия. Однако многочисленные теоретические и экспериментальные работы показали возможность определения плотности дислокаций в материале методом рентгеновской дифракции. Были разработаны методы расчета плотности дислокаций из анализа уширения дифракционных пиков. Принципиально подчеркивалась возможность таких расчетов и из нейтронных дифракционных данных. Традиционным преимуществом нейтронов является их большая глубина проникновения в материалы и, таким образом, получения данных со всего объема образцов или каких-то готовых изделий.

В докладе представлены результаты расчета плотности дислокаций в образце сильно деформированной меди из экспериментальных нейтронографических данных. Эксперименты были выполнены на дифрактометре Д7а, расположенном на горизонтальном канале реактора ИВВ-2М (г.Заречный, Свердловская обл.). Для расчета использовали модифицированный метод Виллиамсона-Халла (Williamson – Hall) [1]. Эксперименты показали возникновения анизотропного уширения дифракционных линий в деформированном образце. Из анализа величин уширения линий в зависимости от Миллеровских индексов были получены расчетные параметры и по ним проведена оценка плотности дислокаций и их типа. Было найдено, что плотность дислокаций в образце $\rho=1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, и, в основном, они являются краевыми. Эти результаты согласуются с данными, полученными на образцах меди обработанных аналогичным образом в одном институте из рентгеновских спектров на двухкристальном рентгеновском дифрактометре с высоким разрешением [1,2].

Работа выполнена с использованием УНУ «ИВВ-2М НМК ИФМ» по теме Института «Поток» при частичной финансовой поддержке Проекта №13-2-047-БЯ УрО РАН.

1. T. Ungar, I. Dragomir, A. Revesz and A. Borbely, J. Appl. Cryst. 32 (1999) 992.
2. T. Ungar, J. Gubicza, G. Ribarik and A. Borbely, J. Appl. Cryst. 34 (2001) 298.

Авторы выражают благодарность Р.З. Валиеву за предоставленные образцы.

Влияние облучения быстрыми нейтронами на структуру Cr-Ni-Mo-Ti аустенитной стали после холодной пластической деформации

В.И. Воронин¹, И.Ф. Бергер^{1,2}, Э.З. Валиев¹, Б.Н. Гоцицкий¹

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Важной задачей для успешной эксплуатации реакторов на быстрых нейтронах и его безопасной работы является создание материалов, радиационностойких до достижения максимальных повреждающих доз 120-140 сна. В настоящее время наиболее перспективным становится аустенитная сталь ЭК-164 (х.д.). Значительный ресурс служебных свойств аустенитных сталей реализуется оптимизацией состава, структуры материалов при выплавке и последующем трубном переделе. Вносимые подбираемые изменения технологических режимов требуют оценки состояния готовых оболочечных труб как в исходном (необлученном) состоянии, так и после облучения в реакторе. Применение методов структурной нейтронографии по сравнению с традиционными методами реакторного материаловедения позволяет получать объёмную информацию с массивных образцов о наличии дефектов, в том числе и дислокаций. Такая возможность была показана на модельных образцах холоднодеформированной меди. Перед исследованием структурного состояния исходных образцов оболочечных труб ТВЭЛов из стали ЭК-164 (х.д.) и его влияние на поведение образцов, эксплуатировавшихся в составе тепловыделяющих сборок (ТВС) реактора на быстрых нейтронах БН-600 мы выполнили тестовые исследования на модельной стали.

В докладе представлены результаты расчета плотности дислокаций из данных нейтронной дифракции на модельных образцах аустенитной стали X16H15M3T1 после деформации до 40% и последующего облучения быстрыми нейтронами. Эксперименты были выполнены на дифрактометре Д7а, расположенном на горизонтальном канале реактора ИВВ-2М (г. Заречный, Свердловская обл.). Для расчета использовали модифицированный метод Виллиамсона-Халла (Williamson – Hall) [1]. Найдено, что с увеличением степени холодной деформации почти линейно растёт плотность дислокаций. В облученных быстрыми нейтронами холоднодеформированных образцах стали X16H15M3T1 из-за радиационно-стимулированной диффузии точечных радиационных дефектов плотность дислокаций понижается, причем более существенно в образцах с исходной большей степенью деформации.

Работа выполнена с использованием УНУ «ИВВ-2М НМК ИФМ» по теме Института «Поток» при частичной финансовой поддержке Проекта №13-2-047-БЯ УрО РАН.

1. T. Ungar, I. Dragomir, A. Revesz and A. Borbely, J. Appl. Cryst. **32** (1999) 992.

Recent Development of the Neutron Guide System at RTD Diffractometer – Improvement of Neutron Beam Characteristics and Conformity with the Modeled Results

S.Valkov, D.Neov, A.Beskrovnyi

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

RTD diffractometer (former DN-2) is installed at IBR-2 research reactor. Recently, it has undergone significant upgrade [1]. During the last 3 years, the neutron guide system has been renewed. The new one consists of 3 consecutive vacuumed sections constructed from steel casing enclosing row of rectangular segments made of floated glass. The segments have inner coating of Ni (natural mixture of isotopes) and are aligned with small angle (about 57°) between each other. The critical scattering vector for neutrons inside the segments is $q_c = 2k \sin(\Theta_c(\lambda)) \approx 4\pi \Theta_c(\lambda) / \lambda \approx 0.0219 \text{ \AA}^{-1}$. The 3 consecutive sections (splitter, main bent part and straight section) differ by their radius of curvature. After exiting the straight section neutrons travel approx. 1m before reaching the sample position.

For detailed investigations of the resultant beam at the end of the mirror guide, neutron beam has been modeled using software package McStas [2]. For some time, results of simulation yielded significant confusion since they did not comply with the experimental ones in many aspects (neutron losses, wavelength and space distribution across the beam). One of the main discrepancies was the shift of the maximum of distribution from approx. 1.9 Å (simulated) to 2.45 Å (measured). The lack of short-wavelength neutrons was considered significant obstacle for precise structural determination of crystal materials. Efforts to simulate current situation by flaws in specific alignment (for example between two segments) did not explain them. More measurements of the real situation of the guide setup however have shown drastic misalignment. The actual radius of curvature of the splitter section differs from the declared one the by a factor of 1.8, the end of the guide appears to be displaced also by factor of 1.6. We performed simulations using data from this recent geometrical measurements and obtained good agreement with the real neutron distribution.

1. С.Г. Шеверев, Real-time diffractometer на 6 канале реактора ИБР-2: текущее состояние (in the same proceedings).
2. K. Lefmann and K. Nielsen, "McStas, a General Software Package for Neutron Ray-tracing Simulations", Neutron News 10, 20, (1999).

Двойной монохроматор нейтронов

В.П. Глазков¹, А.П. Сиротин², В.В. Жук³, Е.С. Кузьмин³

¹ НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ ООО ЛОКУС, Россия

Блок монохроматора состоит из двух юстировочных головок с приводами для параллельного перемещения вдоль монохроматического пучка нейтронов. Синхронное перемещение и поворот двух кристаллов монохроматоров осуществляется с помощью программного обеспечения и точными подвижками.

Интервал углов поворота кристаллов относительно первичного пучка 15° - 60° . Разрешение угла поворота кристаллов монохроматора $0,01^{\circ}$.

Система управления шаговыми двигателями двойного монохроматора основана на контроллерах OSM-4,2 фирмы «Onitex» (РФ). Соединение с ПК 10-и контроллеров OSM-4,2 монохроматора осуществляется по интерфейсу RS485 через преобразователь AC4 (USB-RS485). Каждый контроллер OSM-4,2 после получения команды от ПК обеспечивает автономное управление двигателем. Это позволило установку двойного монохроматора на заданную длину волны производить с использованием одновременного движения всех элементов монохроматора, что существенно экономит время. Гониометрические устройства фирмы «Standa», входящие в состав двойного монохроматора, были модифицированы: на шаговый двигатель был установлен датчик оборота, смонтированный последовательно с концевиками, ограничивающими диапазон перемещения. В результате, точность установки устройств на концевик улучшена почти в 10 раз и составила 1 шаг шагового двигателя.

Нейтронные спектрометры на исследовательском реакторе OPAL, ANSTO

С.А. Данилкин

АНСТО, Сидней, Австралия

Исследовательский реактор *OPAL* был введен в эксплуатацию в 2007 году для проведения исследований на пучках нейтронов, производства радиоизотопов и облучения кремния для полупроводниковой промышленности. В настоящее время на пучках реактора работают 4 дифрактометра, спектрометр малоуглового рассеяния, рефлектометр и трехосный спектрометр. Еще несколько инструментов находятся на разных стадиях завершения – спектрометры по времени пролета, обратного рассеяния, малоуглового рассеяния, трехосный спектрометр холодных нейтронов и установка для нейтронной радиографии [1].

В докладе представлена информация о реакторе *OPAL* и дан обзор спектрометров для изучения неупругого рассеяния установленных на пучках реактора: *Pelican (TOF)* [2], *Sika (TAS)* [3] и *Emu (BackScattering)* [4]. Основное внимание уделено трех-осному спектрометру *Taipan* [5], включая описание основных элементов и параметров инструмента. Приведены экспериментальные результаты иллюстрирующие возможности спектрометра.

1. <http://www.ansto.gov.au/ResearchHub/Bragg/Facilities/Instruments/index.htm>
2. D. H. Yu, R. A. Mole, T. Noakes, S. J. Kennedy and R. A. Robinson, J. Phys. Soc. Japan 82 SA027 (2013).
3. <http://www.ansto.gov.au/ResearchHub/Bragg/Facilities/Instruments/Sika/index.htm>
4. <http://www.ansto.gov.au/ResearchHub/Bragg/Facilities/Instruments/Emu/index.htm>
5. S. A. Danilkin, M. Yethiraj, Neutron News, 20, 37 (2009).

О динамическом торможении дислокаций, колеблющихся под действием медленных нейтронов в диссипативной среде

В.В. Дежин, И.Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Известно, что прогресс при исследовании материалов может быть достигнут только при полном понимании процессов, протекающих в них при воздействии внешних переменных полей. В связи с этим вызывает интерес затухание колебаний дислокаций в диссипативной среде.

В настоящем докладе рассмотрены колебания дислокаций в диссипативной среде под влиянием коротковолнового внешнего воздействия произвольной частоты. Требуемый режим можно создать управляемым потоком медленных нейтронов с длиной волны больше размера ядра дислокации, упруго рассеивающихся на атомах. Получено выражение для мнимой части обратной обобщенной восприимчивости краевой дислокации в диссипативном кристалле:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\mu b_e^2}{2\pi} \omega \int_{|k_z|}^{k_m} k dk \left\{ \frac{\gamma_t}{c_t^2 k^2} - \frac{2\gamma_t}{c_l^2 k^2} + \frac{c_t^2 \gamma_l}{c_l^4 k^2} + \frac{\omega^2 \gamma_t^2}{(c_t^2 k^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2 \gamma_t^2} \left(\frac{\omega^2}{c_t^2 k^2 \gamma_t} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{k_z^4 c_t^2}{k^2 \omega^2 \gamma_t} + \frac{4k_z^4 \gamma_t}{c_t^2 k^6} - \frac{2k_z^4}{k^4 \gamma_t} \right) + \frac{\omega^2 \gamma_l^2}{(c_l^2 k^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2 \gamma_l^2} \left(\frac{2c_t^2}{c_l^2 \gamma_l} - \frac{c_t^2 \omega^2}{c_l^4 k^2 \gamma_l} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{4c_t^2 \gamma_l}{c_l^4 k^2} - \frac{2c_t^2 k_z^2}{\omega^2 \gamma_l} + \frac{k_z^4 c_t^2}{k^2 \omega^2 \gamma_l} + \frac{8k_z^2 \gamma_t^2}{c_t^2 k^4 \gamma_l} - \frac{4\gamma_t^2}{c_t^2 k^2 \gamma_l} - \frac{4k_z^4 \gamma_t^2}{c_t^2 k^6 \gamma_l} - \frac{2\gamma_t}{\gamma_l^2} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{2\omega^2 \gamma_t}{c_l^2 k^2 \gamma_l^2} + \frac{4k_z^2 c_l^2 \gamma_t}{\omega^2 \gamma_l^2} - \frac{4k_z^2 \gamma_t}{k^2 \gamma_l^2} + \frac{8\gamma_t}{c_l^2 k^2} - \frac{2k_z^4 c_l^2 \gamma_t}{k^2 \omega^2 \gamma_l^2} + \frac{2k_z^4 \gamma_t}{k^4 \gamma_l^2} \right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Здесь μ – модуль сдвига кристалла, b_e – краевая компонента вектора Бюргера дислокации, k – волновое число, k_z – компонента волнового вектора вдоль линии дислокации, k_m – максимальное волновое число, $\gamma_t(k)$ и $\gamma_l(k)$ – коэффициенты затухания поперечных и продольных звуковых волн, c_t и c_l – скорости поперечных и продольных звуковых волн в бездиссипативном кристалле, ω – частота. Аналогичное выражение получено и для винтовой дислокации. Проведен анализ этих выражений для случая электронного торможения, в частности найден вклад изгибных колебаний в динамическое торможение дислокаций, который оказался сравним с основным вкладом.

Нейтронная спектроскопия высокоамплитудных солитонных и поверхностных волн нового типа в топливных материалах UO_2 и UN при пороговых динамических нагрузках и температурах

О.А. Дубовский, В.А. Семенов, А.В. Орлов, В.В. Сударев

Физико-энергетический институт, Обнинск, Россия

Методами рассеяния нейтронов и компьютерного моделирования исследуется микродинамика высокоамплитудных нелинейных колебаний кристаллических решеток двухатомных топливных материалов ядерных реакторов - двуокиси урана и нитрида урана при температурах до 3000 К вблизи порогов плавления, диссоциации и разрушения. В спектральной щели между полосами частот акустических и оптических фононов обнаружены резонансы поверхностных фононных колебаний нового типа и заполняющая щель полоса их генетических продолжений -нелинейных локальных колебаний. Предэкспонента волновой функции этих поверхностных колебаний определяется оригинальной композицией, включающей элементы волновых функций и акустических и оптических волн. На нейтронном спектрометре ДИН-2ПИ в щели между зонами акустических и оптических волн обнаружены резонансы этих поверхностных колебаний и за оптической зоной обертоны оптических колебаний. По расстояниям между резонансами определяются размеры кристаллитов. При последовательном увеличении интенсивности динамической нагрузки и увеличении соответствующей температуры в двуокиси урана обнаружены пять условно разграниченных областей температур. В этих областях последовательно генерируются фононы, одиночные солитоны, пары взаимно рассеивающихся одиночных солитонов, парные пучки солитонов с разными скоростями, рассеивающихся после отражения от границ и мультисолитонные пучки. Проведено компьютерное моделирование микродинамики теплопереноса с определением температурной зависимости коэффициента теплопроводности, согласующейся с экспериментальными данными. В экспериментально измеренной температурной зависимости теплопроводности двуокиси урана наблюдались 3 области температур значимого увеличения и снижения теплопроводности. Показано, что в этих 3-х областях и 2-х интервалах между ними микродинамика теплопереноса определяется указанными солитонными механизмами. Показано, что в нитриде урана солитоны и бисолитоны инициируют образование и схлопывание динамических пор с генерацией обнаруженных поверхностных колебаний атомов на границах пор, испарение атомов и атомных кластеров, образование трещин и разрушение материалов. Показано, что массоперенос атомов азота в трещинах и по границам зёрен может осуществляться микродинамическим механизмом сёрфинг – диффузии атомов азота на высокоамплитудных солитонных волнах.

Исследования проведены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Калужской области.

3d-димер на металлической подложке в магнитном поле

М. Г. Дудник¹, В. М. Уздин^{2,3}

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

Была исследована возможность изменения магнитного состояния простейшей магнитной системы – 3d-димера на немагнитной подложке в рамках неколлинеарного обобщения модели Александра-Андерсона [1,2]. Разным химическим элементам соответствует различное число d-электронов, локализованных на атомах димера. Именно этот параметр определяет обменное взаимодействие между атомами, которое меняется по мере увеличения числа d-электронов от антиферромагнитного у хрома через неколлинеарное (Mn-Fe) к ферромагнитному Fe-Co-Ni. При числе d-электронов, близком к 7 основное состояние димера неколлинеарно и обменное взаимодействие не описывается моделью Гейзенберговского типа [3,4]. В этой области внешнее магнитное поле сильно влияет на магнитное состояние, приводя к существенному увеличению полного магнитного момента димера.

На атомном масштабе, внешние магнитные поля необходимые для перемагничивания оказываются очень большими [5,6]. Тем не менее, вблизи точки перехода по числу d-электронов от антиферромагнитного к ферромагнитному состоянию, система становится более чувствительной к внешнему полю.

Эффекты управления магнитной структурой в монослоях Fe на W(100) были продемонстрированы экспериментально в [7]. Механизм такого перемагничивания аналогичен эффекту внешнего магнитного поля рассмотренному выше.

1. Alexander S., Anderson P.W., Phys. Rev. 1964. V. 133. N 6A. P. A1594.
2. Uzdin V.M., Yartseva N.S., *Computational Mat. Sc.* 1998. V. 10, P. 211.
3. Costa A.T., Jr., Muniz R.B., Mills D.L., Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 137203.
4. Бессараб П.Ф., Дудник М.Г., Уздин В.М., Известия РАН. Серия физическая, 2013. Т.77, № 1, С. 64.
5. Uzdin V.M., Vega A., *J. of Phys.: Cond. Mat.* 2012. V. 24. P. 176002.
6. Tan H., Martinez E., Vega A. et al., Sur. Sc. 2009. V. 603. P. 2537.
7. Schmidt R., Schwarz A., Wiesendanger R., Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 174402.

Магнитные свойства поверхностей и гетеропереходов перовскитов

С.М. Дунаевский

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Известно, что в зависимости от химического состава и степени легирования оксиды переходных элементов с кристаллической структурой перовскита (манганиты, кобальтиты и др.) могут иметь различные типы магнитного упорядочения, которые для объемных структур хорошо изучены экспериментально и качественно поняты теоретически. К сожалению, магнитные свойства различных поверхностей ультратонких пленок, гетероструктур и сверхрешеток манганитов практически не изучены. Известно только, что в большинстве случаев магнитные свойства поверхностей существенно отличаются (в худшую сторону) от магнитных характеристик объема.

Работа посвящена рассмотрению магнитных свойств свободных поверхностей (100) и (111) ряда перовскитов и гетеропереходов на их основе. В ней представлены результаты “ab-initio” расчетов, выполненных в рамках метода псевдопотенциала с использованием комплекса программ “Quantum Espresso”, которые сравниваются с существующими экспериментальными результатами нейтронных и теоретических исследований [1-3]. Проведение подобных расчетов позволяет делать выводы о существовании и критической толщине “мертвых” магнитных монослоев (dead layers) (Fe, Co, LaMnO₃ ...) на различных немагнитных подложках (SrTiO₃, BaTiO₃, Si и пр.) [4].

Особый интерес представляют собой двойные слои (111) кубических перовскитов, структура которых допускает существование состояния топологического изолятора [5].

1. J. Stahn et al., Phys. Rev. B 71, 140509(R) (2005).
2. A. Hoffmann et al., Phys. Rev. B 72, 140407(R) (2005).
3. J. Chakhalian et al., Nature Phys. 2, 244 (2006).
4. M. J. Calderón, L. Brey, and F. Guinea, Phys. Rev. B 60, 6698(1999).
5. D. Xiao, W. Zhu, Y. Ran, N. Nagaosa, and S. Okamoto, (2011), arXiv:1106.4296.

Разработка кристаллических схем для трех- и четырехкристального спектрометра на совершенных кристаллах

Н.О. Елютин^{1,2}, Д.В. Львов^{2,1}, А.Н. Тюлюсов^{2,1}

¹ НИЯУ Московский инженерно-физический институт, Москва, Россия

² Институт теоретической и экспериментальной физики НИЦ КИ, Москва, Россия

Эксперименты с совершенными кристаллами на рентгеновских и, позднее, на нейтронных пучках имеют уже более чем столетнюю историю [1]. Первый реализованный инструмент — это двухкристальный спектрометр на совершенных («идеальных») кристаллах при их параллельной установке. Эта схема, применяющаяся при изучении макроскопических (более или порядка 1 μm) неоднородностей по рассеянию нейтронов на малые углы была усовершенствована использованием кристаллов с пропилом и разработкой брэгговской секционной топографии. При этом регистрируется лишь отраженное от второго кристалла излучение. Однако, некоторую интегральную информацию о неоднородностях в материале можно получить, изучая прошедший пучок (метод Уоррена), что было реализовано и теоретически обосновано [2].

Введение третьего, параллельно установленного, кристалла позволяет изучать неоднородности (дислокации, малоугловые границы, кластеры примесей) в малых концентрациях содержащихся в почти совершенных кристаллах. В двухкристальном варианте они лишь на 10-20% уширяют рефлекс, в случае трехкристаллической схемы, при повороте третьего кристалла образуют диффузный пик на месте упругого рефлекса. Роль образца здесь играет второй кристалл.

Введение четвертого кристалла в параллельную позицию с первыми тремя не дает преимуществ, по сравнению с использованием кристаллов с пропилом. Однако, антипараллельная установка второго и третьего кристаллов дает инструмент, сочетающий высокое угловое ($3''$) и энергетическое (10^{-5} эВ) разрешение, что было подтверждено опытами.

В работе излагаются возможности, предоставляемые техникой перемещения и поворота кристаллов и наборами пластин Si и Ge с наиболее мощными отражениями (111) и (220). Кроме этого даются расчеты предполагаемой интенсивности пучков, перекрываемые спектральные диапазоны в пределах тепловой части спектра нейтронов ($\sim 0.7\text{-}2$ Å) и необходимая оснастка (фильтры излучения, коллимационные щели, юстировочные устройства и т.п.).

Расчеты сделаны в привязке к предполагаемой интенсивности пучков реактора ПИК с уверенностью, что установка подобного прибора расширит экспериментальные его возможности.

1. Ю.Г. Абов, Н.О. Елютин, А.Н. Тюлюсов, ЯФ, 65, 1989 (2002).

2. Н.О. Елютин, Д.В. Львов, Ю.И. Смирнов, А.Н. Тюлюсов, ПТЭ, 4, 5 (2007).

Исследование магнитных структур V/Fe/Cr/Fe/Nb и V/Fe_{0,7}V_{0,3}/V/Fe_{0,7}V_{0,3}/Nb при низких температурах методом рефлектометрии поляризованных нейтронов

В.Д. Жакетов, Ю.В. Никитенко

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Теоретически предсказаны различные эффекты близости в слоистых структурах ферромагнетик/сверхпроводник. Один из таких эффектов - криптоферромагнитное состояние в ферромагнетике, контактирующем со сверхпроводником. Экспериментально это состояние в настоящее время не обнаружено. Его обнаружение актуально с фундаментальной точки зрения существования нового явления магнетизма в ферромагнитно-сверхпроводящих слоистых структурах. Актуальность исследований носит и прикладной характер, связанный с разработкой носителей информации, основанных на двойном кодировании, с помощью магнитного момента и электрической проводимости.

В первых экспериментальных исследованиях на образце V/Fe_{0,7}V_{0,3}/V/Fe_{0,7}V_{0,3}/Nb обнаружена магнитная нанорешётка, модифицирующаяся при переходе слоёв ванадия и ниобия в сверхпроводящее состояние.

В экспериментах со структурой V/Fe/Cr/Fe/Nb с неразбавленными ферромагнитными слоями наблюдалось более слабое рассеяние нейтронов на магнитной решётке при температуре в диапазоне 4-4.5 К, что ниже температур сверхпроводящих переходов в слоях ванадия и ниобия.

Важны дальнейшие исследования в магнитном поле и при изменении температуры, направленные на изучение поведения магнитных и структурных параметров магнитной решётки.

**Программное обеспечение для анализа
нейтронных дифракционных *real-time* данных**

В.Б. Злоказов¹, И.А. Бобриков¹, Н.Ю. Самойлова^{1,2}, А.М. Балагуров¹

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, Москва, Россия

В ЛНФ ОИЯИ на импульсном реакторе ИБР-2 дифракция и малоугловое рассеяние нейтронов используются для изучения необратимых процессов в конденсированных средах *in situ* в реальном времени. В стандартной постановке такого рода экспериментов поликристаллический (в общем случае многофазный) образец подвергается внешнему воздействию, зависящему от времени определенным образом (непрерывно или скачкообразно). Результатом эксперимента является последовательность файлов, измеренных за определенные, как правило, короткие промежутки времени. В случае упругого рассеяния каждый из файлов представляется как спектр $s_i(x, P_i)$, где индекс i относит спектр к интервалу времени t_i , в течение которого проведено измерение, x – экспериментальная переменная, по которой проведено сканирование спектра (переданный импульс, угол рассеяния, время пролета), P_i – набор параметров, характеризующих текущее структурное состояние образца.

Программный анализ каждого i -го этапа структурной эволюции исследуемого образца включает:

- поиск пиков в спектре,
- их индексацию,
- определение их положений и площадей,
- уточнение структурного состояния образца по методу Ритвельда.

Важным моментом анализа является то, что информация, полученная на i -м этапе, является исходной для $i + 1$ -го этапа.

Созданное программное обеспечение (пакет SPEVA) позволяет провести перечисленные действия в автоматическом режиме. Успешное его проведение предполагает предварительный качественный анализ структурной эволюции образца. В частности, предполагаются известными его начальное состояние и структурные фазы, появление которых возможно в ходе эволюции. Результатом анализа являются зависимости от времени структурных характеристик фаз, включая их относительное количество, параметры элементарных ячеек, координаты атомов, факторы заполнения структурных позиций.

В качестве примера работы программы рассмотрена эволюция структуры инвертированной шпинели CuFe_2O_4 в диапазоне температур 20 - 500°C при фазовом переходе между тетрагональной и кубической фазами.

Структура поверхности высокоориентированного графита

В.Г. Кириченко

Харьковский национальный университет, Харьков, Украина

В сообщении приведены результаты исследования структурных особенностей поверхностного слоя графита по данным сканирующей электронной микроскопии для выяснения причин латеральных отклонений в моноатомных углеродных листах с учетом атомного окружения углерода в слое графита.

Исследовали атомную реальную поверхность высоко ориентированного кристалла графита типа, образованную и очищенную скалыванием верхнего слоя кристалла непосредственно перед измерением. Поверхность графита исследовали методом сканирующей туннельной микроскопии при нормальных условиях. Полученные экспериментальные данные были использованы при построении трехмерных диаграмм для ячеек с помощью программы Harvard Chart XL 2,0. Полученные диаграммы отражают строение моноатомного поверхностного слоя графита.

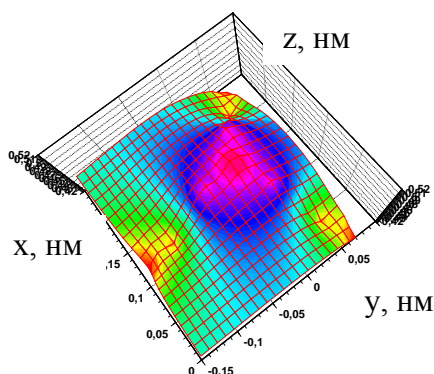


Рис. 1. Структура ячейки графита с учетом только первых ближайших соседей

В результате анализа 3D-диаграмм с характерными размерами и симметрией элементарной ячейки графита обнаруживаются тетрагональные структурные особенности симметрии центральных атомов ячеек, и проявляющиеся при одновременном учете первых и вторых соседей. Тенденцию к тетраэдричности в трехмерном случае оказывается можно наблюдать и в двумерном случае. Такие тетрагональные особенности отмечались ранее при обнаружении крупномасштабных структур на поверхности графита [1].

Для анализа этих эффектов целесообразно ввести треугольные ячейки, с различными ближайшими соседями. Из зависимостей смещений Z^+ (вертикальное смещение атомов вверх) и Z^- (вертикальное смещение атомов вниз) от lgx (x - поперечное смещение атомов в слое) для построенных ячеек получено, что вертикальное смещение в ячейке $1x1$ больше, чем для ячейки $7x7$ на всех уровнях масштабирования.

1. В.Г. Кириченко, Е.С. Мельникова. Вестник ХНУ им. В.Н. Каразина. № 878. – 2009. - Вып. 4 - С. 79 – 85.

Сверхтонкие взаимодействия в сплавах циркония

В.Г. Кириченко

Харьковский национальный университет, Харьков, Украина

Особое место в ядерной энергетике занимает проблема создания и модернизации конструкционных материалов с оптимальной структурой и высокими эксплуатационными свойствами. К конструкционным материалам активной зоны ядерных реакторов принадлежат, прежде всего, циркониевые сплавы и стали. Развитие новых экспериментальных методов исследования сверхтонких взаимодействий (СТВ) в твердых телах, таких как эффект Мессбауэра, способствовало формированию такого направления, как ядерно-физические методы регистрации и исследования СТВ в сплавах [1].

В сообщении приводятся основные результаты экспериментальных ядерных гамма - резонансных исследований структурно-фазовых превращений в сплавах циркония с добавками железа, ниобия и других элементов, эффективно модифицирующих микроструктуру сплавов. Проведено систематическое исследование взаимодействия легирующих добавок с атомами-зондами Fe^{57} и Sn^{119} в сплавах циркония в альфа - области. Полученная трехмерная диаграмма в координатах $C - \delta - \Delta$ (концентрация-изомерный сдвиг-квадрупольное расщепление) позволила провести корректную обработку и идентификацию фаз в сплавах циркония. Показано, что локальное окружение атомов Fe существенно изменяется при комплексном легировании α -Zr. Идентифицированы интерметаллические фазы в тройных и четверных сплавах сложного состава. Предложена модель формирования интерметаллических фаз, учитывающая электронную структуру легирующих добавок в цирконии. Исследованы основные механизмы трансмутационных эффектов в сплавах циркония с помощью сравнительного анализа экспериментальных результатов и моделирования трансмутационных эффектов. Обнаруженная приповерхностная сегрегация интерметаллических включений позволяет на микроскопическом уровне оценить роль выделений, механизмы и пути повышения радиационной и коррозионной стойкости циркониевых сплавов. Поверхностная сегрегация тесно связана с формированием интерметаллических фаз и протекающими в них фазовыми превращениями. За счет высокой чувствительности к локальному ближайшему окружению ядер-зондов методы СТВ позволяют однозначно идентифицировать дефекты и изучить процессы изменения структурно-фазового состояния сплавов при ионном и лазерном облучении.

1. Кириченко В.Г., Азаренков Н.А. Ядерно-физическое металловедение сплавов циркония., Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина. - 2012. - 336 с.

Малоугловое рассеяние поляризованных нейтронов на магнитном сплаве с периодической кристаллической мезоструктурой

А.В. Ковалев, В.В. Рунов, М.К. Рунова

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Для изучения взаимосвязи кристаллических и магнитных (доменных) мезоструктур использовался сплав ЮНДК, в котором методом спиноподального распада формируются периодические распределения фаз разного химического состава.

Измерения выполнялись на установке «Вектор» реактора ВВР-М. Средняя длина волны поляризованных нейтронов $\langle \lambda \rangle = 0.92$ nm. Плоские пластинки ($d \approx 2$ nm) вырезались параллельно разным граням исходных немагнитных заготовок и помещались в электромагнит с вертикальным магнитным полем. Типичные картины малоуглового рассеяния при направлении магнитного поля ($H = 10.8$ kOe) вдоль оси текстуры (кривые 1, 2) и в ортогональном направлении (кривые 3, 4) показаны на рис. 1. Период мезоструктуры $D = 44.4(5)$ nm; бóльшие интенсивности дифракционных пиков соответствуют сумме ядерной и магнитной амплитуд рассеяния (spin up). Параметры центральных пиков малоуглового рассеяния связаны с размерами и пространственной ориентацией магнитных доменов. Интерференция нейтронных волн приводит к сильным отличиям интегральных интенсивностей Q этих пиков для противоположных направлений спинов нейтронов в первичном пучке, а отношение $N = Q_{\text{spin down}}/Q_{\text{spin up}}$ оказывается мерой намагнитченности образца. Максимальная величина $N = 2.4(2)$ обнаружена для пластинок, плоскости которых ортогональны оси текстуры (рис. 2).

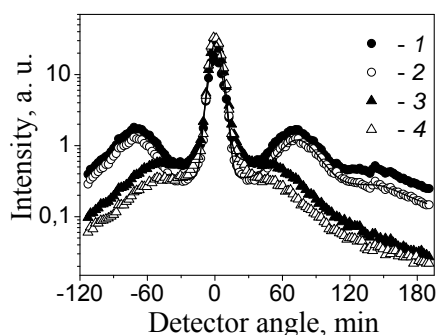


Рис.1. Типичные картины малоуглового рассеяния при направлении магнитного поля ($H = 10.8$ kOe) вдоль оси текстуры и в ортогональном направлении

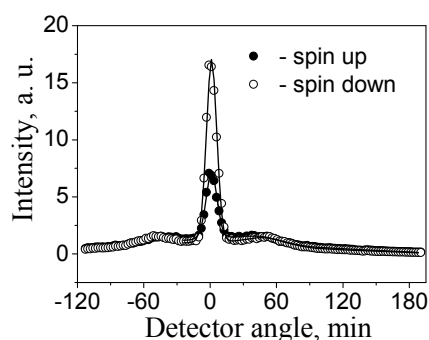


Рис.2. Максимальная величина для пластинок, плоскости которых ортогональны оси текстуры

Изложенная методика исследований позволяет получать уникальную информацию о доменной структуре сплавов с периодической кристаллической мезоструктурой.

**Эталонные средства для дифрактометрии.
Нейтроннографическое исследование кварца**

Б.Н. Кодесс¹, Е.Э. Ридер², В.А. Сарин²

¹ *Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, Москва, Россия*

² *Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики, Москва, Россия*

Кварц хорошо известен не только благодаря фундаментальному значению для химии и физики минералов, но и благодаря широкому применению в различных технических устройствах. Монокристаллы кварца также используются для создания эталонов в различных видах физико-механических измерений. Для дифрактометрических видов определения структурных параметров такие эталоны для анализа монокристаллов еще только разрабатываются. Приводятся результаты нейтроноструктурного исследования при разных температурах монокристаллов синтетических образцов кварца из партии, предназначенной для создания эталонных средств измерений (стандартного образца дифракционных свойств). Нейтронные данные показывают величины значений позиционных параметров атомов структуры кварца, несколько отличные от рентгеновских данных, для которых получено хорошее согласие координат атомов кремния и кислорода с данными других авторов. Однако различие лежит в пределах 3-х сигма. Различия в тепловых параметрах превышают стандартные отклонения и могут быть вызваны в нейтроннографических измерениях влиянием экстинкции. Полученные данные позволяют считать, что приготовленная партия монокристаллов кварца может быть основой для создания первого эталонного образца метрологического обеспечения дифрактометрических измерений монокристаллов с использованием рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений. Он будет дополнять систему аналогичных эталонных средств измерений для поликристаллических образцов, которые уже имеются и поставляются ФГУП ВНИИМС для различных организаций в России. Проведенные сопоставления показали, что точностные характеристики этих СО не хуже или превышают для СО в системе НИСТ, предназначенной для США.

Нейтроннографическое изучение манганитов-мультиферроиков $\text{Yb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$

А.А. Кунцевич, А.И. Курбаков, А.Л. Малышев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Представлены нейтронограммы $\text{Yb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ в интервале температур от 2.6 К до комнатной (рис. 1), измеренные на дифрактометре SSPD (ПИЯФ). Исследована температурная эволюция кристаллической и магнитной структуры.

Кристаллическая структура $\text{Yb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ представляет собой смесь ромбической ($Pbnm$) и гексагональной ($P6_3cm$) фаз (последняя как в недопированном YbMnO_3 [1]). Обнаружено, что различия в фазовом составе зависят от методики синтеза образцов. Так для образца, приготовленного по стандартной керамической методике, это соотношение составляет 43% для орторомбической и 57% для гексагональной фаз. Показано, что для образца приготовленного методом мягкой химии можно получить разный фазовый состав; это обусловлено, главным образом, температурой и продолжительностью отжига (рис. 2). Таким образом мы получаем возможность управления соотношением фаз и, соответственно, физическими свойствами. Продемонстрирована обратимость и возобновляемость данного эффекта.

При температуре $T_N^{ort}=130$ К в $\text{Yb}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$ происходит магнитное упорядочение орторомбической фазы в магнитную структуру С-типа. А магнитное упорядочение в гексагональной кристаллографической фазе в нем появляется при $T_N^h=85$ К и представляет собой магнитную структуру Γ_2 -типа.

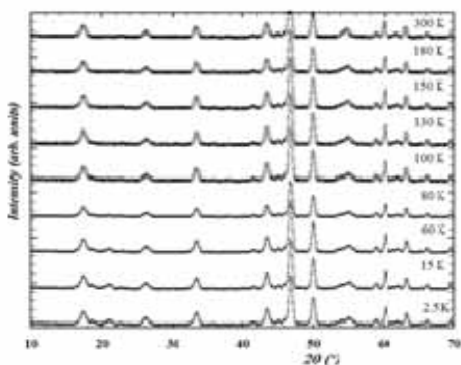


Рис. 1. Фрагменты нейтронограмм $\text{Yb}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$

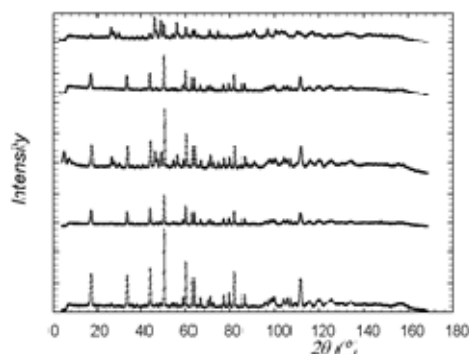


Рис.2. Экспериментальные нейтронограммы $\text{Yb}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3$ для некоторых температур и времен отжига

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 12-02-00073.

1. X. Fabrèges, I. Mirebeau, et al., *Phys. Rev. B* 78, 214422 (2008).

Эволюция магнитного порядка в NdMn_2O_5

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

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

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

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

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

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

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

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

Эффект ускорения нейтрона при прохождении совершенного кристалла вблизи брэгговского отражения

*М.В. Ласица^{1,2}, Ю.П. Брагинец^{1,2}, Е.О. Вежлев^{1,2}, И.А. Кузнецов¹,
С.Ю. Семенихин¹, В.В. Воронин^{1,2}, В.В. Федоров^{1,2}*

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

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

В рамках проекта по поиску электрического дипольного момента нейтрона кристалл-дифракционным методом [1,2], проведено исследование преломления нейтрона при прохождении совершенного кристалла вблизи брэгговского отражения.

Показано, что вблизи точного выполнения брэгговского условия для какой-либо системы кристаллографических плоскостей показатель преломления нейтрона ведет себя резонансным образом с шириной порядка брэгговской ширины отражения.

Обнаружен новый эффект – ускорение нейтрона на брэгговском резонансе при перемещении кристалла с переменной скоростью.

Эффект обусловлен тем, что незначительное изменение скорости кристалла за время пролета нейтрона через него, приводит к существенному изменению отклонению от условия Брэгга и, следовательно, к изменению потенциала взаимодействия нейтрона с кристаллом. В результате, возникает ненулевая разница потенциалов взаимодействия нейтрона с кристаллом на входной и выходной границах и, соответственно, изменение энергии нейтрона.

Экспериментально измеренное изменение энергии нейтрона при прохождении кристалла кварца толщиной 5 см вблизи отражающей плоскости (220) достигало 20 нэВ, при перемещении кристалла с частотой 4,5 кГц и скоростью до 3 мм/с.

1. Федоров В.В., Воронин В.В. Новые возможности поиска ЭДМ нейтрона поляризационным методом при дифракции в кристалле без центра симметрии. Физика атомных ядер и элементарных частиц (Материалы Юбилейной XXX Зимней школы ПИЯФ, ч.1), СПб, 1996, с.123-164.

2. V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, E. Lelièvre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, V.V. Voronin, Yu.P. Braginetz, Measurement of the neutron electric dipole moment via spin rotation in a non-centrosymmetric crystal, Physics Letters B 694 (2010) 22-25.

Hard X-ray interferometers based on planar silicon technology

M. Lyubomirskiy¹, I. Snigireva¹, V. Yunkin², S. Kuznetsov², V. Kohn³,
A. Snigirev¹

¹ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

² *Institute of Microelectronics Technology and High-Purity Materials RAS,
Chernogolovka, Russia*

³ *NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia*

The evolution of X-ray sources such as third generation synchrotrons and free electron lasers led to a development of different interferometry techniques. Techniques such as Young's double slit interferometer [1] or Fresnel's double mirror [2, 3] in the hard X-ray region were recently realized. Modern microfabrication technologies allow profiling of Si crystals to a significant depth with a high quality of sidewalls offering manufacturing of planar compound refractive lenses (CRL) and interferometers [4, 5]. The CRL based Bilens interferometer consists of two parallel lens arrays separated by a distance smaller than the spatial coherence length of the incoming beam [5]. The interferometer produces the interference pattern i.e. standing wave with a variable period ranging from tens of nanometers to tens of micrometers, depending on the observation distance. To extend a bilens interferometer beam acceptance we have developed a multilens system, which uses more than two parallel lenses. The increase of the acceptance allows raising intensity and contrast of the interference pattern at the expense of interference maxima narrowing.

In addition the planar microfabrication technology allows to create optical systems in the reflection geometry. A sidewalls quality of etched structure is good enough to realize total external X-ray reflection using bi- and multi-mirror arrangements at any split distances.

Thus the strong advantage of planar Si technologies is the ability to create integrated optical systems consisting of refractive optics [4], lens- [5] and mirror-based interferometers. We believe that this new interferometry approach opens up new possibilities of developing X-ray nano-metrology and nano-diagnostic techniques.

1. W. Leitenberger, S. M. Kuznetsov, and A. Snigirev, *Opt. Commun.* 191, 91-96 (2001).
2. K. Fezzaa, F. Comin, et al., *J Xray. Sci. Technol.* 7, 12-23 (1997).
3. W. Leitenberger, and U. Pietsch, *J. Synchrotron. Radiat.* 14, 196-203 (2007).
4. A. Snigirev, I. Snigireva, et al., *proc SPIE* 6705, 670506 (2007).
5. A. Snigirev, I. Snigireva, et al., *Phys. Rev. Lett.* 103, 064801 (2009).

Высокоинтенсивные источники УХН на реакторах ВВР-М и ПИК

*В.А. Лямкин, А.П. Серебров, А.К. Фомин, М.С. Онегин, А.Г. Харитонов,
Д.В. Прудников, С.А. Иванов*

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

На базе действующего исследовательского реактора ВВР-М и строящегося исследовательского реакторного комплекса ПИК предлагается создать ряд высокоинтенсивных источников ультрахолодных нейтронов (УХН) для научных исследований в области фундаментальной физики и изучения наноструктур.

На новых источниках УХН запланирована программа исследований фундаментальных взаимодействий. Она включает в себя поиск электрического дипольного момента нейтрона и прецизионное измерение времени жизни нейтрона. Обе задачи имеют принципиальное значение для физики элементарных частиц и космологии.

На реакторе ВВР-М имеются весьма подходящие условия для решения такой задачи. Это наличие тепловой колонны реактора, которая представляет собой канал большого диаметра (1 м), примыкающий к активной зоне реактора. Такой диаметр канала позволяет расположить мощную свинцовую защиту от γ -излучения активной зоны реактора, графитовый предзамедлитель при температуре 20 К, чтобы получать холодные нейтроны, и наконец, собственно источник УХН на основе сверхтекучего гелия при температуре 1.2 К. В источнике планируется достижение плотности УХН 10^4 н/см³, что в 1000 раз превышает существующую.

Реактор ПИК входит в число самых мощных в мире высокопоточных источников нейтронов. Горизонтальные каналы реактора ПИК ГЭК-3 и ГЭК-4 будут оснащены жидкодейтериевыми источниками холодных нейтронов. На этих пучках планируется установить источники для производства УХН. Ожидаемая плотность УХН будет в 100 раз превышать плотность УХН на существующих в мире источниках, достигнув значения $1.3 \cdot 10^3$ н/см³.

На пучках УХН будут проводиться работы наших коллег из Курчатовского института, ОИЯИ и зарубежных коллег. В настоящее время эти работы проводятся в ILL. Однако физика УХН начиналась в России, и было бы важно восстановить российские приоритеты в этой области и переместить центр исследований с УХН в Гатчину.

1. А.П. Серебров, В.А. Митюхляев, А.А. Захаров и др., NIMA 611, 276 (2009).
2. А.П. Серебров, В.А. Митюхляев, А.А. Захаров и др., Физика твердого тела 52, 969 (2010).
3. А.П. Серебров, Crystallography Reports 56, 1230 (2011).
4. А.П. Серебров, С.Т. Болдарев, А.Н. Ерыкалов и др., Physics Procedia 17, 251 (2011).
5. А.П. Серебров, А.К. Фомин, М.С. Онегин и др., Письма в ЖТФ 40, 24 (2014).

Исследование реальной структуры кристаллов TeO_2 во внешнем электрическом поле рентгенодифракционными методами

*Н.В. Марченков¹, А.Е. Благов¹, О.А. Кондратьев¹, А.Г. Куликов¹,
Ю.В. Писаревский¹, П.А. Просеков¹, М.В. Ковальчук^{1,2}*

¹*Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

Кристалл парателлурида (TeO_2) является популярным акустооптическим материалом и широко применяется в качестве рабочих элементов устройств акустооптики [1]. Более того, он признан весьма перспективным нелинейным оптическим материалом для бриллуэновских лазеров [2]. Многолетний и неослабевающий интерес исследователей привлекают также оптические [3], фотоупругие, пьезоэлектрические и особенно упругие [4] свойства. Исследование реальной дефектной структуры кристаллов парателлурида, в том числе, в условиях внешнего электрического поля, является на сегодняшний день актуальной задачей.

Для исследования степени совершенства структуры кристаллов TeO_2 были использованы фазочувствительный метод многоволновой дифракции и метод стандартной двухволновой дифрактометрии. В работе показано, что многоволновая дифракция в силу своих особенностей (чувствительность к фазе рентгеновских волн и деформациям решетки одновременно в нескольких пространственных направлениях) позволяет получить информацию о реальной структуре, зачастую скрытую для двухволновой дифракции.

Также в рамках работы проведено исследование обнаруженного эффекта образования неферроидных доменов в кристаллах TeO_2 под воздействием внешнего постоянного электрического поля (ЭП). Данный эффект характеризуется наличием пороговой напряженности поля, при которой начинают образовываться домены, и большими временами установления равновесного состояния (вплоть до нескольких часов в зависимости от напряженности электрического поля). Кристалл возвращается к исходному монодоменному состоянию также в течение нескольких часов после выключения поля. Методом высокоразрешающей трехкристальной рентгеновской дифрактометрии определено, что домены, сохраняя параэластическую тетрагональную фазу, поворачиваются друг относительно друга в пространстве, при этом значение параметра решетки в доменах остается одинаковым. Размеры доменов составляют 2–4 мкм в зависимости от напряженности поля.

1. Dubinskii M. A. and Merkle L. D. // in Proceedings of the Conference on Advanced Solid-State Photonics, Santa Fe, New Mexico, 2004, edited by G. Quarles (Optical Society of America, Washington, DC, 2004), V. 94, P. 451.

2. Uchida N. // Phys. Rev. 1971. V. B 4, P. 3736.

3. Uchida N. and Ohmachi Y. // J. Applied Phys. 1969. V. 40, P. 4692-4695.

4. Peercy P. S. and Fritz I. J. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 32, P. 466.

Исследования по поиску криптоферромагнетизма в ферромагнитно-сверхпроводящих слоистых структурах

Ю.В. Никитенко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Проведены нейтронные исследования ферромагнитно-сверхпроводящих слоистых структур $V/Fe_{1-x}V_x/V(Cr)/Fe_{1-x}V_x/Nb$, где $x=0$ и 0.3 , на предмет образования в ферромагнитных слоях скрытого ферромагнетизма (криптоферромагнетизма). Обнаружено влияние сверхпроводящих переходов в слоях ванадия и ниобия на магнитную решётку, предположительно образованную косвенным обменным взаимодействием. Трансформация магнитной решётки состоит в изменении её периода, зависящего от температуры и магнитного поля аналогично сверхпроводящей корреляционной длине. Сделан вывод об образовании в окрестности температур сверхпроводящих переходов нового упорядоченного магнитного состояния, формируемого магнитным и сверхпроводящим параметрами порядка.

E-mail: nikiten@nf.jinr.ru

**Резонансная дифракция синхротронного излучения
в дигидрофосфате калия**

Е.Н. Овчинникова¹, Г. Бютье^{2,3}, С.П. Коллинз³, Г. Нисбет³, А.П. Орешко¹,
В.Е. Дмитриенко⁴

¹ Московский государственный университет ФФ, Москва, Россия

² SIMaP, CNRS & Grenoble INP, Grenoble, France

³ Diamond Light Source, United Kingdom

⁴ Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Запрещенные отражения 002 и 222 в дигидрофосфате калия KH_2PO_4 (КДП) были изучены в широком интервале температур при энергии падающего излучения вблизи К-края поглощения калия. Эксперименты выполнены на синхротронах DIAMOND (Англия) и ESRF (Франция). Интервал температур (от 80 К до 300 К) включал температуру фазового перехода 123 К из тетрагональной параэлектрической фазы в орторомбическую сегнетоэлектрическую фазу. Отражения 002 и 222 остаются «запрещенными» при переходе из пара- в орторомбическую фазу, однако наблюдается резкое увеличение их интенсивности из-за понижения симметрии кристалла и снятия запрета на диполь-дипольный резонансный вклад в структурный фактор [1]. В параэлектрической фазе наблюдался рост интенсивности отражений с температурой, а также перестройка их энергетического спектра, более ярко выраженная для отражения 222. Для объяснения наблюдаемых явлений в работе развит феноменологический подход, в котором резонансная часть структурного фактора представлена как сумма диполь-квадрупольного, термоиндуцированного вкладов и вклада, обусловленного понижением симметрии окружения резонансных атомов, соответствующей мгновенным конфигурациям протонов. Рассмотрены три вида протонных конфигураций: полярная, типа Слэтера и типа Такаги. С помощью квантомеханических и *ab initio* методов (программы VASP[2] и FDMNES [3]) рассчитаны координаты атомов с учетом релаксации, соответствующей разным протонным конфигурациям, а также энергетические спектры отражений 002 и 222 для разных температур. Расчеты хорошо описывают экспериментальные данные и показывают наличие вклада от мгновенных протонных конфигураций в структурный фактор запрещенных отражений. Сходные результаты были получены для дигидрофосфата рубидия на синхротроне PETRA III [4].

Расчеты выполнены с использованием суперкомпьютерного комплекса СКИФ МГУ. Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-00760.

1. G.Beutier, S.P.Collins, et al., Journal of Physics Conference Series 519, 012006 (2014).
2. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B54, 11169 (1996).
3. Y. Joly, Phys. Rev. B 63 125120 (2001).
4. C. Richter, D.V.Novikov, et al., Phys. Rev. B 89, 094110 (2014).

Памяти Г. М. Драбкина, обзор его ключевых достижений

А.И. Окороков

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Данный обзор посвящен памяти Гильяри Моисеевича Драбкина - основателя твердотельских нейтронных исследований на реакторе ВВР-М, основателя Школы поляризованных нейтронов, доктора физ.-мат. наук, профессора, Лауреата Государственной премии СССР. Более 25 лет он руководил созданным им сектором ИКС (Исследования Конденсированного Состояния) в ПИЯФ, а затем до самой смерти 27 июня 2014 г. был занят проблемами стохастических резонансов в Hahn-Meitner институте в Берлине. Старожилы ПИЯФ и других реакторных институтов России и зарубежья хорошо знают Драбкина и его научные достижения. Для них данным сообщением я просто напоминаю о былом, а для молодых сотрудников, аспирантов и студентов, думаю, будет полезным узнать, как зарождалась нейтронная физика в России и какой след оставил нам уникальный ученый Г.М.Драбкин.

Еще в преддверии физ-пуска реактора ВВР-М (декабрь 1960) Драбкин Г.М. и Житников Р.А. предложили возможность получения сверххолодных поляризованных нейтронов (ЖЭТФ, 1960, т.38, 1013) охлаждением их в магнитных полях. А уже в 1962 Драбкин Г.М. опубликовал работу под названием «Анализ энергетического спектра поляризованных нейтронов с помощью магнитного поля (ЖЭТФ, 1962, т.43, N2, 1107-1108). Это знаменитая «Гармошка Драбкина», легко управляемая в качестве спектрометра и получившая широкое использование в качестве монохроматора. Развитая методика трех-мерного анализа поляризации нейтронов позволяет в одном эксперименте получить с высокой точностью полные сведения о рассеянии с выделением упругого и неупругого рассеяния, ядерного рассеяния и фона. Воспитанной им группой были экспериментально найдены и исследованы 3-х спиновые корреляции, разработана методика «косой геометрии», с помощью которой с высокой точностью изучены явления в спиновой динамике магнетиков - жесткость дипольной динамики, факторизация импульсной зависимости тройных динамических вершин при больших переданных импульсах, спиновые волны, магнитная анизотропия, захваченный магнитный поток в сверхпроводниках и пр. Г.М.Драбкин активно участвовал на всех Совещаниях РНИКС и обещал приехать на данное Совещание РНИСК-2014, но судьба распорядилась по своему.

Neutron and thermal analysis of new derivatives, modified terpenoids

M. Ordon^{1,2}, M.D. Ossowska – Chruściel², D. Chudoba^{1,3}

¹Joint Institute for Nuclear Research, FLNP, Dubna, Russian Federation

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

³Adam Mickiewicz University, Faculty of Physics, Poznań, Poland

The properties of a new series of thioesters: 4-(4-nonyloxybenzylthio) benzoates modified menthol (9OSBm), thymol (9OSBt) and carvacrol (9OSBc) are reported [1]. The chemical structure and purity of all substances were established with ¹H NMR, ¹³C NMR and FT-IR spectroscopy. Mesomorphism was characterised with differential scanning calorimetry (DSC), polarizing optical microscopy (POM) and transmitted light intensity (TLI).

9OSBm exhibited polymorphism of crystalline phases. Replacement of the cyclohexyl ring of menthol part on an aromatic ring which is in 9OSBt and 9OSBc did not affect the appearance of the mesophases. All samples are stable and do not decompose after the transition to the isotropic phase.

In addition, study of the dynamics of selected functional groups for a basic substance which is menthol, using NERA spectrometer, operating at pulse reactor IBR-2 in Joint Institute for Nuclear Research in Dubna, was performed. What is more, for full vibrational characteristics of the functional groups of menthol, the infrared spectroscopy at the temperature range 20 K – 300 K was carried out. They were compared with the spectra generated using quantum-chemical methods. The equilibrium geometries, harmonic vibrational frequencies and infrared intensities for isolated molecule were computed using the density functional theory (DFT) with B3LYP functional. The basis sets used were 6-31G*, 6-31+G* and 6-311G**.

1. Ossowska-Chruściel M.D., “Synthesis and mesomorphic properties of some new chiral thiobenzoates containing three rings”, *Liquid Crystals*, Vol. 34, No. 2, (2007), pp.195–211.

***In-situ* экспериментальное и теоретическое исследование фазового перехода в $\text{Mn}(\text{BH}_4)_2$**

И.А. Панкин¹, А.А. Гуда¹, В.П. Дмитриев², А.В. Солдатов¹

¹Южный федеральный университет, МИЦ «Интеллектуальные материалы», Ростов-на-Дону, Россия

²SNBL at ESRF, Polygone Scientifique Louis Néel, Grenoble, France

Борогидрид марганца $\text{Mn}(\text{BH}_4)_2$ является перспективным материалом водородной энергетики. Благодаря уникальным термодинамическим свойствам и возможности адсорбировать и выделять водород при относительно низких температурах и давлениях, это соединение зарекомендовало себя как перспективный материал для использования в качестве твердотельных система хранения водорода.

В настоящей работе был исследован фазовый переход, наблюдаемый при нагревании образца, сопровождаемом обильным выделением водорода. Понимание механизмов фазового перехода и определение продуктов реакции термического разложения $\text{Mn}(\text{BH}_4)_2$ необходимо для улучшения цикличности реакции заряда/разряда. При полной десорбции водорода, реакция разложения становится вовсе необратимой.

В ходе экспериментальной части исследования в *in-situ* режиме при нагревании образца были получены спектры поглощения за К-краем Mn, а также рентгеновские дифрактограммы. Термогравиметрический анализ в совокупности с данными порошковой дифракции указывает на фазовый переход, сопровождающийся обильным выделением водорода в температурном интервале от 110 °С до 140 °С. В аналогичном температурном интервале наблюдаются существенные изменения в XANES спектрах. Значительное уширение пиков XRD спектров указывает на аморфизацию исходного материала. Поэтому для определения вероятных продуктов реакции разложения мы использовали методику XANES спектроскопии. В ходе теоретической части было проведено моделирование спектров поглощения за К краем Mn для различных боридов марганца и металлической фазы марганца Mn_{met} .

Анализ полученных результатов указывает, что наиболее вероятно образование в качестве продуктов реакции металлической фазы марганца в сочетании с одним из следующих боридов в аморфной форме: Mn_2B , MnB и MnB_4 . Фитинг весовых коэффициентов для рассмотренных комбинаций позволяет заключить, что концентрация фазы Mn_{met} не превышает 35%. Проведены *ab-initio* расчеты методами молекулярной динамики (программный комплекс VASP) по оптимизации моделей кластеров Mn-B, а также элементарной ячейки $\text{Mn}(\text{BH}_4)_2$, с учетом десорбции водорода. Для оптимизированных моделей рассчитаны спектры поглощения. Результаты оптимизации согласуются с предсказанием эмпирического правила Натоли и указывают на уменьшение межатомных расстояний Mn-B в результате нагрева.

1. R. Liu, D. Reed, and D. Book, Journal of Alloys and Compounds 515 (2012) 32.

Деформированные состояния кристаллической решётки в кубическом кристалле $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$

В.Д. Пархоменко, В.И. Максимов, С.Ф. Дубинин, Т.П. Суркова

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Легирование полупроводниковых матриц $A^{II}B^{VI}$ $3d$ - ионами с не сферически симметричной электронной d - оболочкой даже в малых количествах оказывает сильное дестабилизирующее влияние на исходную кристаллическую структуру [1]. В настоящей работе представлены результаты проведенного при комнатной температуре нейтрон-дифракционного исследования объёмного кубического кристалла $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$. Для ионов ванадия характерна плохая растворимость в соединениях II-VI, поэтому по содержанию $3d$ - примеси в рассматриваемом кристалле состав относится к высоким уровням легирования.

Дифракционные картины монокристалла $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$ наряду с сильными брэгговскими рефлексами ГЦК-фазы включают в себя сложную систему сверхструктурных максимумов. Проявления тенденций к понижению симметрии, наложений коротковолновых и длинноволновых модуляций интерпретируются как следствие возмущений со стороны легированных ионов ванадия и кооперативного отклика решётки матрицы на указанные возмущения, в пределах создаваемых ими неоднородно деформированных нанобластей структуры. Картины нейтронного рассеяния, снятые в продольных высокосимметричных направлениях обратной решётки кристалла $Zn_{0.9}V_{0.1}Se$, указывают на существование внутренних деформаций, не равных нулю при усреднении в масштабах макроуровня. Попытки охарактеризовать на основе экспериментальных данных деформированное состояние, даже с учётом кристаллографической анизотропии, приводят к выводу о существенной неоднородности макродеформации в материале. Учитывая родственность структур гексагональной и кубической модификации исходного соединения $ZnSe$, полученные результаты рассматриваются как проявление предпереходного состояния к реконструктивному переходу из кубической в гексагональную фазу, на фоне которого видится одновременно несколько тенденций к трансформациям структуры.

Работа выполнена с использованием УНУ “ИВВ-2М НМК ИФМ” по теме института “Поток” при частичной финансовой поддержке программы исследований УрО РАН “Фундаментальные проблемы физико-технических наук” (проект № 12-Т-2-1006).

1. В.И. Соколов, С.Ф. Дубинин и др., ФТТ 50, 1697 (2008).

О возможности применения синхротронного излучения для изучения механизмов магнитоэластического эффекта в сплавах

А.В. Покоев, Ю.В. Осинская

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Ранее авторами [1] был установлен устойчивый эффект заметного возрастания микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2 при старении в постоянном магнитном поле (ПМП), который, в соответствии с представлениями [2], можно отнести к разновидности магнитоэластического эффекта (МПЭ) в металлических сплавах. Так как при этом пластические свойства сплава уменьшаются, наблюдаемый эффект можно классифицировать как «отрицательный» post MPЭ в диамагнитных металлических сплавах с магнитной памятью [3]. Дальнейшее исследование кинетических закономерностей проявления MPЭ в модельных бинарных Cu-Be сплавах [4, 5], выявили существенную роль добавок Ni в формировании MPЭ. Вследствие чего, было выполнено комплексное экспериментальное исследование влияния легирующих добавок Ni (0.4 и 1.0 вес. %) на кинетику процесса старения Cu-Be сплавов в ПМП.

Анализ полученных экспериментальных данных показывает, добавка Ni в количестве 0.4 вес. % приводит к существенному увеличению микротвердости Cu-Be сплава до 36 % по сравнению со сплавом без никеля, а добавка никеля в количестве 1.0 вес. % к увеличению микротвердости до 38 %. Можно предположить, что увеличение микротвердости в сплаве, в состав которого входит Ni, связано с тем, что примесь Ni приводит к формированию более эффективных препятствий для движения дислокаций, и тем самым приводит к существенному увеличению микротвердости. Кроме этого обнаружено, что наложение ПМП всегда приводит к увеличению микротвердости до ~35 %, т.е. наблюдается «отрицательный» MPЭ.

На данный момент идет поиск экспериментальных методов для определения мест локализации, форм кластеризации добавок никеля (в частности, для определения функции распределения кластеров и фаз по размерам) в сплавах. По мнению авторов, такими наиболее продуктивными методами исследования являются методы синхротронного и нейтронного излучения. Их применение позволит глубже понять механизмы формирования MPЭ.

1. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев, ФХОМ. 3, 18 (2003).
2. Ю.И. Головин, ФТТ. 46, 769 (2004).
3. Р.Б. Моргунов, А.Л. Бучаченко, ЖЭТФ. 136, 505 (2009).
4. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев, А.К. Раджабов, В.В. Рунов, ФТТ. 54, 531 (2012).
5. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев, Известия РАН. Серия физическая. 77, 1256 (2013).

Иерархия фазовых переходов и спиновые корреляции в Fe-Mn-Ga

В.В. Рунов¹, В.В.Ховайло², М.К. Рунова¹, R. Kainuma³, T. Omori³

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

³ Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai, Japan

Для сплавов Гейслера на основе Mn характерно сильное взаимодействие кристаллических и магнитных подсистем, поэтому они находят практическое применение и интенсивно исследуются. Сплав Ni-Mn-Ga безусловно являлся самым исследуемым сплавом. Однако в настоящее время во многих научных центрах синтезируются и изучаются, с целью улучшения функциональных свойств материала, и другие композиции сплавов, в частности, Fe-Mn-Ga.

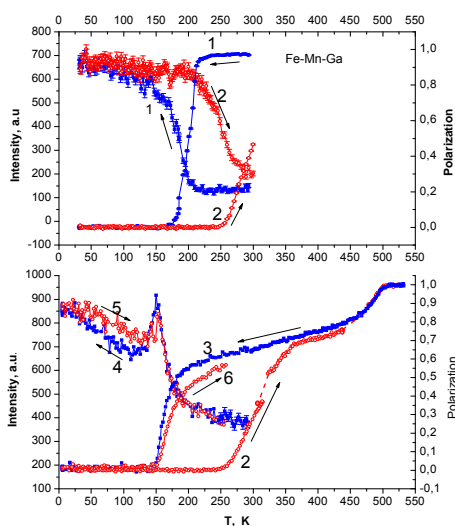


Рис.1. Температурная зависимость интенсивности рассеяния при переданном импульсе $q=0.005 \text{ \AA}^{-1}$ и поляризации ($q=0$) для двух режимов:

1) верхний рисунок – измерения на исходном «закаленном» образце, цикл охлаждения – нагрев до RT.

2) нижний рисунок – измерения после первого охлаждения до 10K: нагрев до RT, продолжение нагрева в печи до 530K с последующим охлаждением в криорефрижераторе до 10K и нагревом до RT.

Последовательность измерений соответствует номеру кривых на рисунках.

Этот сплав, как и Ni-Mn-Ga, имеет сложную фазовую диаграмму состояний, включающую фазовые переходы первого и второго рода, характерные температуры которых зависят от состава сплава и режимов термообработки. В работе получены данные по температурной зависимости интенсивности рассеяния и деполяризации в сплаве $\text{Fe}_{48}\text{Mn}_{24}\text{Ga}_{28}$ в широком диапазоне температур на разных стадиях термообработки. О сложности фазовой диаграммы в данном сплаве можно судить по Рисункам, на которых приведены данные деполяризации и рассеяния на образце при разных режимах термообработки. Наблюдается целый каскад фазовых переходов разного рода.

В работе получены данные о характерных температурах и температурной зависимости критических флуктуаций.

Использование методов рентгеновской дифрактометрии и аномального рассеяния на синхротронном излучении для исследования процессов антиузельного разупорядочения в НТСП-материалах на основе Nb₃Sn в результате протонного облучения

*Р.Д. Светогоров,¹ Я.В. Зубавичус,¹ С.В. Шавкин,¹ А.И. Рязанов,^{1,2}
Rene Flukiger^{2,3}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Université de Genève, Женева, Швейцария

³ CERN, Женева, Швейцария

Синхротронное излучение предоставляет широкие возможности для исследования эволюции микроструктуры различных соединений. В частности, интересной является задача исследования структурных изменений в низкотемпературных сверхпроводящих материалах в процессе их облучения высокоэнергетичными частицами. Известно [1], что в результате облучения нейтронами в материалах образуется большое число радиационных дефектов, что приводит к нарушению упорядоченной структуры материала и, в конечном счете, к деградации его сверхпроводящих характеристик. Однако существенно меньше информации доступно для случая облучения быстрыми протонами, хотя эффекты деградации свойств при больших дозах облучения могут проявляться более сильно.

Цель работы состояла в том, чтобы с использованием различных синхротронных методик исследовать эволюцию микроструктуры образцов на основе Nb₃Sn в процессе облучения протонами с различной энергией и дозой. Образцы были синтезированы проф. Р.Флюкигером (CERN, Швейцария), облучение проводилось на циклотроне НИЦ «Курчатовский институт» при комнатной температуре.

Основным видом структурных повреждений, возникающих в образцах под действием облучения, являются пары антиузельных радиационных дефектов (атомы ниобия перемещаются в позиции олова и наоборот). Для прецизионного определения концентрации таких дефектов были разработаны и использованы различные методики, в частности с использованием эффекта аномального рассеяния. Для этого измерялось поведение интенсивности рефлекса Nb₃Sn 110, наиболее чувствительного к радиационным дефектам, вблизи края поглощения ниобия. Моделируя эту зависимость можно с высокой точностью получать значения фактора разупорядочения (прямо пропорционального концентрации олова в позиции ниобия).

1. A.E. Karkin, V.E. Arkhipov et al., Physica Status Solidi. 1976. V. 38. №2. P. 433-438.

Роль размерного фактора в формировании структуры сплавов Fe-(Cr, V, Mo) по рентгенодифракционным данным

И.С. Смирнов¹, И.С. Монахов¹, Е.Г. Новоселова¹, А.Л. Удовский²

¹ *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

² *Институт металлургии и материаловедения РАН, Москва, Россия*

Сплавы с ОЦК-структурой на основе железа являются базовыми составляющими ферритных сталей, которые представляют большой интерес как материалы оболочек ТВЭЛов для реакторов на быстрых нейтронах.

В работе изучено влияние концентрации легирующих компонентов с различным атомным радиусом на параметр кристаллической решетки и размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) сплавов. Были исследованы образцы чистого железа и его сплавов с хромом, ванадием и молибденом в диапазоне концентраций 2-8 ат. %.

Эксперименты проводились на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3, оснащенный автоматизированной системой управления на базе персонального компьютера. Для определения параметра кристаллической решетки применялся метод сравнения с эталоном. В качестве эталона был использован кристалл кремния, параметр решетки которого измерен прецизионным методом Бонда.

В результате исследований получены зависимости параметров кристаллической решетки сплавов от концентрации легирующих компонентов. Показано, что во всех случаях наблюдается отклонение от линейного закона Вегарда, а при легировании ванадием зависимость имеет аномальный характер. Установлено, что увеличение атомного радиуса (размерный фактор) и концентрации легирующего компонента приводит к росту полуширины дифракционных линий и уменьшению оцененных размеров ОКР сплавов. Для сплава Fe-8 ат.% Cr изучено влияние степени поверхностного наклепа на размеры ОКР.

Полученные экспериментальные результаты подтверждают вывод, сделанный в [1] на основании модельных расчетов, описывающих межатомные взаимодействия компонентов в ферромагнитных ОЦК твердых растворах о том, что с ростом размерного фактора должно происходить уменьшение размера области стабильности ОЦК фазы и изменение размеров зерен.

Исследования поддержаны грантом по проекту РФФИ 13-03-00482_a.

1. А.Л. Удовский. Металлы, 2011, № 5, с. 121-143.

**Особенности строения монокристаллов мультиферроика
 $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$**

*Е.С. Смирнова, О.А. Алексеева, И.А. Верин, А.П. Дудка, В.В. Артёмов,
К.В. Фролов, И.С. Любутин*

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Разнообразие свойств ферроборатов $RFe_3(BO_3)_4$ ($R = Y, PЗЭ$) обусловлено наличием в них двух магнитных подсистем: ионов железа и редкоземельных ионов. Большое количество экспериментальных и теоретических работ последнего времени связано с обнаружением фазовых переходов в новом мультиферроике $GdFe_3(BO_3)_4$ [1], при этом многие фундаментальные вопросы, относящиеся к природе этих эффектов, до сих пор не выяснены.

В настоящей работе методами прецизионного рентгеноструктурного анализа и абсорбционной мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe при различных температурах исследованы особенности строения монокристаллов $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$. Химический состав монокристаллов уточнен методом рентгеновского энергодисперсионного элементного анализа.

Параметры элементарной ячейки монокристаллов $Gd_{0.95}Bi_{0.05}Fe_3(BO_3)_4$ измерены в интервале температур 295–30 К на четырехкружном рентгеновском дифрактометре HUBER-5042 с криостатом DISPLEX DE-202 (APD Cryogenics inc). Зафиксирован фазовый переход при $T = 155$ К. При снижении температуры ниже 80 К наблюдаются аномалии – рост значения параметра элементарной ячейки c при плавном уменьшении параметров a и b , а также объема. Область структурных аномалий перекрывается с областью 40–150 К возникновения необычного уширения парамагнитных мёссбауэровских спектров и областью магнитного упорядочения ионов железа ниже 40 К.

Полные наборы интенсивностей дифракционных отражений при температурах 293 и 90 К получены на дифрактометре CCD Xcalibur S Oxford Diffraction. Структуры определены прямыми методами и уточнены в программе JANA2006. Установлено наличие мерздрических двойников. На картах синтезов разностной электронной плотности выявлены пики, которые распределены в плоскости ab структуры вблизи положений ионов Gd и Fe. Остаточные пики электронной плотности вблизи ионов Fe вытянуты по направлению от осей вращения третьего порядка, перпендикулярных плоскости ab , вокруг которых формируются геликоидальные цепочки атомов железа.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-02-00483а и гранта поддержки ведущих научных школ НШ-1130.2014.5.

1. S.A. Klimin, D. Fausti, A. Meetsma et al., Acta Cryst. B61, 481 (2005).

**Нейтронно-радиографическая установка на пучке
холодных нейтронов РК ПИК. Проект**

В.А. Соловей, А.А. Захаров, В.Т. Лебедев

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Нейтронная радиография – метод неразрушающего контроля и исследования веществ и материалов. Одни из наиболее современных нейтронно-радиографических установок на европейских нейтронных исследовательских находятся на реакторе FRM-II, в PSI на spallation нейтронном источнике в NIST, OakRidge National Laboratory. Также на China Advanced Research Reactor установлены две нейтронно-радиографических установки. Также в английском центре ISIS, европейском нейтронном центре ESS и на китайском строящемся spallation нейтронном источнике предусмотрены нейтронно-радиографические установки.

Области применения нейтронно-радиографических установок на пучке холодных нейтронов: нейтронная радиография высокого разрешения, нейтронная томография и томография высокого разрешения (до 20 мкм) с использованием поляризованных (неполяризованных) нейтронов, непрерывная нейтронная радиография для визуализации и регистрации динамических процессов, стробоскопическая нейтронная радиография для визуализации и регистрации повторяющихся процессов, фазоконтрастная нейтронная радиография, сканирование по длине волны: определение углов Брэгга и изучение материалов при углах близких к углам Брэгга, магнитное отображение.

Предварительный состав нейтронно-радиографической установки на пучке холодных нейтронов РК ПИК: входной быстрый шаттер, узел сменных коллиматоров, узел фильтров, селектор нейтронов по скорости, монохроматор, поляризатор, система для подавления вторичного гамма излучения, два щелевых коллиматора, столы для тяжелых и легких образцов, комплект блоков детектирующей системы, системы поддержания физических условий на образце.

В докладе будут сформулированы основные требования к узлам нейтронно-радиографической установки.

Атомная и электронная структура новых наноструктурированных конденсированных материалов для возобновляемых источников тока

*Г.Б. Сухарина¹, В.В. Шаповалов¹, А.А. Гуда¹, О.Е. Положенцев¹, А. Поль²,
А.В. Солдатов¹*

¹*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

²*Институт нанотехнологий, Карлсруэ, Германия*

На сегодняшний день задача определения параметров динамики атомной структуры новых наноструктурированных материалов для возобновляемых источников тока имеет важное прикладное значение. Несмотря на преимущества литий-ионных батарей по характеристикам мощности и емкости в сравнении со своими аналогами [1], они имеют ряд недостатков, таких как необратимая деградация материала при слишком глубоком разряде и возможность самовозгорания при высоких нагрузках. Разработка и усовершенствование материалов имеет решающее значение для производства надежных и безопасных возобновляемых источников тока.

В настоящей работе проведено исследование локальной атомной и электронной структуры нового наноструктурированного материала для возобновляемых источников тока на основе нанокompозита $V_2O_5/Fe/LiF$ в процессе электрохимического цикла зарядки-разрядки.

При изучении динамики атомной структуры использовали спектроскопию XANES (X-ray absorption near edge structure), рентгеновскую дифракцию XRD (X-ray diffraction). Теоретический анализ экспериментальных данных для определения параметров атомной структуры в процессе первого цикла зарядки-разрядки был выполнен с использованием программного комплекса FitIt09[2] на основе метода основных компонент. Моделирование спектров рентгеновского поглощения осуществлялось в полном потенциале методом конечных разностей, реализованном в программном комплексе FDMNES2009[3].

В результате выполненного исследования найдено, что в процессе первого цикла зарядки происходит трансформация металлического железа, входящего в состав нанокompозита более чем 50% во фторид железа (II), образовавшиеся свободные ионы лития интеркалируются в структуру аморфного V_2O_5 с образованием соединения $LiVO_2$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.A18.21.1153.

1. D. Aurbach, Journal of Power Sources.71, 146 (2005).
2. G. Smolentsev, A. V. Soldatov, Comp. Mat. Science. 569, 39 (2007).
3. Y. Joly, Phys. Rev.B. 125120, 63 (2001).

Нейтронные суперзеркальные анализаторы поляризации веерного типа

В.Г. Сыромятников^{1,2}

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

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

В последние годы в поляризационных нейтронных установках заметное распространение получили двухкоординатные позиционно-чувствительные детекторы с площадью чувствительной области не менее 400 см². В связи с этим возникла острая необходимость в создании широкоапертурных анализаторов поляризации, позволяющих проводить поляризационный анализ по всей обширной области детектируемого пучка. Использование многоканальных суперзеркальных анализаторов поляризации веерного типа позволяет решить эту проблему для нейтронной рефлектометрии.

В докладе представлены нейтронные суперзеркальные анализаторы поляризации веерного типа, созданные в ПИЯФ НИЦ КИ для нейтронной рефлектометрии [1-3].

1. Yu.V. Nikitenko, V.A. Ul'yanov, V.M. Pusenkov, S.V. Kozhevnikov, K.N. Jernenkov, N.K. Pleshanov, B.G. Peskov, A.V. Petrenko, V.V. Proglyado, V.G. Syromyatnikov, A.F. Schebetov. Nuclear Instruments and Methods A 564 (2006) p. 395.

2. V.G. Syromyatnikov, et al., Nuclear Instruments and Methods A 634 (2011) s126.

3. V.G. Syromyatnikov, et al., Journal of Physics: Conference Series 528 (2014) 012021.

**Нейтронно-синхротронные исследования атомной динамики
металлических стекол**

Г.Ф. Сырых

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Проведены измерения спектров неупругого рассеяния нейтронов и синхротронного излучения металлических стекол Zr-Be на установках IN4, BRISP (ILL) и ID28 (ESRF).

Обсуждаются вопросы получения информации о дисперсии акустических и оптических мод в неупорядоченных системах.

**Возможности рентгеноакустической дифрактометрии
для исследования кристаллов**

*А.В. Таргонский¹, А.Е. Благов¹, Ю.В. Писаревский¹, П.А. Просеков¹,
Я.А. Элиович¹, М.В. Ковальчук^{1,2}*

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

В настоящее время одной из наиболее актуальных тенденций развития методологии структурных исследований динамических объектов и систем является переход от исследований объекта «до и после» к изучению непосредственно динамики процесса на основе времяразрешающих методов.

Для решения этих задач требуется модернизация всего экспериментального комплекса. Одним из требований является быстрое изменение параметров эксперимента. Управление рентгеновским пучком в условиях синхротронных станций подразумевает использование большого количества рентгенооптических элементов. При этом изменение условий может вызывать определенные трудности, связанные с необходимостью механического перемещения элементов. В этой связи разработка способов немеханического управления с возможностями временного разрешения представляет особый интерес.

Для решения этих задач авторами был предложен и развит новый класс рентгенодифракционной аппаратуры [1-2], в основе которого лежат возможности управления пространственно-временными характеристиками рентгеновского пучка с помощью кристаллов промодулированных длинноволновым ультразвуком. К преимуществам предлагаемого метода следует отнести возможности проведения прецизионных экспериментов (до 0.1 угл.сек) с высоким временным разрешением (до 3 мкс). С помощью ультразвука можно в широких пределах изменять межплоскостное расстояние выбранного семейства атомных плоскостей, что вызывает модуляцию углового положения дифрагированного рентгеновского пучка.

В докладе будут представлены экспериментальные методы акустического сверхбыстрого управления рентгеновским пучком, а также результаты исследований кристаллических материалов с применением рентгеноакустических методик. Работа выполнена при фин. поддержке грантов РФФИ 14-02-31451 мол_а, 14-22-01042 офи_м и гранта Президента РФ МК-4476.2014.2.

1. Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г., Писаревский Ю.В.//ЖЭТФ 2005.Т.128 с.893.

2. Ковальчук М.В., Таргонский А.В., Благов А.Е., Занавескина И.С., Писаревский Ю.В. Кристаллография, 56, вып. 5, 2011, с.886-889.

Влияние магнитного поля на формирование наночастичек ферромагнитной фазы при старении сплава Cu-Mn-Al

Д.А. Трояновский¹, А.О. Перекос², В.В. Кокорин¹

¹ *Институт магнетизма НАН и МОНУ, Киев, Украина*

² *Институт металлофизики НАНУ, Киев, Украина*

Причиной интереса к исследованию сплава системы Cu-Mn-Al есть то, что при определенном подборе состава эти сплавы вместе с такими свойствами, как эффект памяти формы, термоупругость и сверхупругость [1], демонстрируют суперпарамагнетизм [2] и гигантское магнетосопротивление [3]. В результате старения сплавов Cu-Mn-Al образуется система дисперсионных ферромагнитных частичек фазы Cu₂MnAl в парамагнитной матрице Cu₃Al. Поскольку при старении в Cu-Mn-Al происходит распад перенасыщенного твердого раствора с выделением ферромагнитных частичек, изучения влияния магнитного поля на этот процесс является, безусловно, актуальным.

В работе исследовалось влияние магнитного поля при отжиге на магнитные и магнитотранспортные свойства сплавов Cu-Mn-Al таких составов: Cu-7,21Mn-13,5Al (% мас.), Cu-5,03Mn-12,4Al (% мас.), Cu-13,1Mn-12,6Al (% мас.). Методом рентгеноструктурного анализа было установлено, что в образцах, обработанных термически, реализуется двухфазная система в виде ферромагнитных наночастиц, диспергированных в магнитной матрице, и определены ее параметры. Показано, что отжиг в магнитном поле приводит к увеличению температуры Кюри исследованных сплавов.

Таким образом, полученные данные открывают возможность практического применения сплавов Cu-Mn-Al исследуемых составов в медицине [4, 5].

1. К. Отцука, К. Симидзу и др., Сплавы с эффектом памяти формы (1980).
2. Т. В. Ефимова, В. В. Кокорин и др., ФММ, 64, 189 (1987).
3. S. Sugimoto, S. Kondo, et al., J. Alloys Comp., 265, 273 (1998).
4. Y. Sutou, R. Kainuma, et al., J. Mater. Sci. Eng. A. 273-275, 375 (1999).
5. Y. Sutou, T. Omori, et al., J. Phys. IV. 112, 511 (2003).

Особенности кристаллической и магнитной структур двойных перовскитов $Ba_{2-x}Sr_xFeMoO_6$ ($x=0-1.6$)

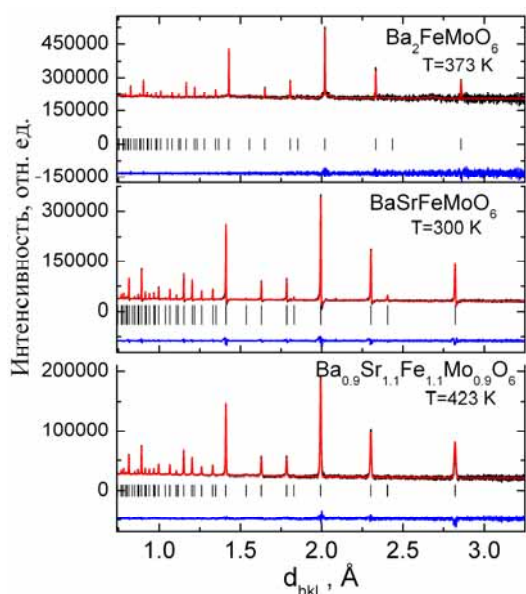
В.А. Турченко^{1,2}, Н.А. Каланда³, Л.В. Ковалев³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт НАНУ, Донецк, Украина

³ Научно-практический центр НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь

Магнитные перовскиты с общей формулой $A_2B'B''O_6$ (где $A=La; Pr; Sr; Ba$ и т.д., а B' и $B''=W; Co; Mn; Fe; Mo$ и т.д.) и твердые растворы на их основе привлекают внимание исследователей благодаря высокой степени спиновой поляризации электронов проводимости, значительным туннельным



магниторезистивным эффектам в слабых магнитных полях при комнатной температуре [1,2]. Это открывает широкие перспективы их практического применения в устройствах спиновой электроники (спинтроники) для создания спиновых клапанов и сенсоров магнитного поля. Цель данной работы – установить влияние температурного фактора и замещения ионов бария ионами стронция на структурные особенности и магнитные свойства двойных перовскитов: $Ba_{2-x}Sr_xFeMoO_6$ ($x=0-1.6$). Образцы были получены методом твердофазного синтеза при температуре

$1200^{\circ}C$ в непрерывном потоке H_2/Ag в течение 10 ч. Для уточнения кристаллической и магнитной структуры были проведены нейтронные исследования образцов на Фурье дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) [3] на импульсном реакторе ИБР-2 в Дубне. Согласно данным нейтронной дифракции (см. рис.) все исследованные образцы однофазные. При замещении ионов Ba ионами Sr наблюдается изменение типа кристаллической решетки: кубический ($Fm-3m$) → ромбический ($Fmmm$) → тетрагональный ($I4/m$). При этом, объем элементарной ячейки и значения температуры Кюри – уменьшаются.

1. К.-И. Kobayashi, Т. Kimura, Н. Sawada, К. Terakura, Y. Tokura // Nature (London) 395 (1998) 677.

2. A.W. Sleight, J.F. Weiher // J. Phys. Chem. Solid 33 (1972) 679.

3. А.М. Balagurov // Neutron News V. 16, №3 (2005) 8.

Исследование эффектов магнитной близости в гетероструктурах ферромагнетик/антиферромагнетик методами рентгеновской резонансной рефлектометрии и спектроскопии поглощения

В.В. Федоров, С.М. Сутурин, А.Г. Банищиков, Д.А. Баранов, С.В. Гастев, К.В. Кошмак, Н.С. Соколов

Физико-технический институт РАН, Санкт-Петербург, Россия

Эффектами магнитной близости называют явления связанные с взаимодействиями, происходящими на границе раздела различных фаз. Одним из примеров является “эффект “обменного смещения” петли гистерезиса [1] наблюдаемый в системе ферромагнетик (ФМ) / антиферромагнетик (АФМ), и уже нашедший ряд практических применений. Данная работа посвящена исследованию эффектов близости в эпитаксиальных гетероструктурах с ФМ мягким (Ni) или магнито жестким (Co) слоями на поверхности АФМ фторидов марганца и никеля ($T_{Нееля}$ 67 и 73 К). Использование элементарно-селективных синхротронных методик рентгеновского магнитного кругового дихроизма (*X-ray Magnetic Circular Dichroism, XMCD*) и рентгеновской резонансной магнитной рефлектометрии (*X-ray Resonant Magnetic Reflection, XRMR*) позволило исследовать магнитные свойства каждого из слоев гетероструктуры в отдельности. Ранее с помощью метода XMCD было обнаружено [2], что даже при 300К в гетероструктурах Co/MnF₂ на границе слоя MnF₂ существует нескомпенсированный магнитный момент направленный противоположно намагниченности слоя кобальта. Результаты XRMR измерений так же подтвердили существование при 300К в гетероструктурах Ni/MnF₂, Co/NiF₂ наведенной намагниченности направленной противоположно намагниченности ФМ. В проведенных измерениях были получены спектральные зависимости кривых отражения и дихроизма (асимметрии) отражения (Рис.1), позволяющие повысить достоверность фитирования элементарно-селективного профиля распределения намагниченности по глубине. Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (14.V25.31.0025; Мегагрант). XMCD/XRMR эксперименты выполнены на синхротронах Elettra (Триест, Италия), и Photon Factory (Цукуба, Япония).

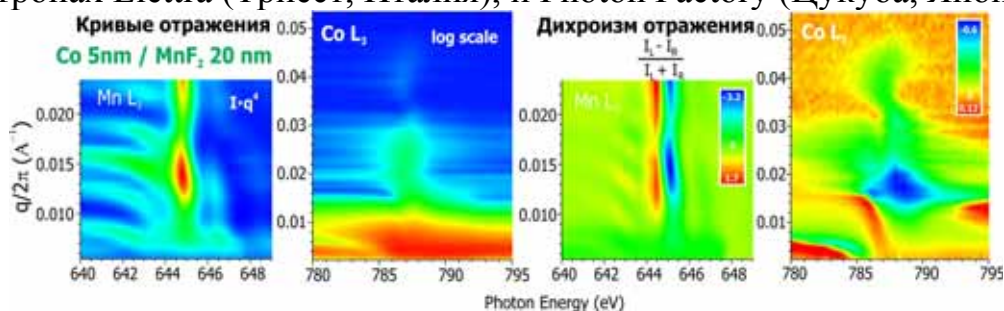


Рис.1. Спектральные зависимости кривых отражения и дихроизма (асимметрии) отражения вблизи L_3 края поглощения Mn и Co.

1. P.K. Manna, S.M. Yusuf, Physics Reports 535 61–99 (2014).
2. S. M. Suturein, V. V. Fedorov et al., J. Phys.: Condens. Matter, 25 046002 (2013).

Структура и дифракция на спиральных нанотрубках произвольного химического состава

А.Р. Хадиев¹, З.Я. Халитов¹, Д.М. Пашин¹

¹ Казанский национальный исследовательский технический университет - КАИ,
Казань, Россия

Исследование структуры и свойств тубулярных наноструктур представляет огромный интерес вследствие значительного потенциала их применения. Экспериментальные исследования методами просвечивающей электронной микроскопии позволили определить два способа формирования кристаллического пространства нанотрубок: последовательный рост коаксиальных цилиндрических слоев (coaxial nanotubes) и сворачивание слоя в спиральный рулон (scroll nanotubes). Кристаллография и теория дифракции на коаксиальных нанотрубках развивается вполне успешно. Между тем, вплоть до недавнего времени [1–3], кристаллографическое описание спиральной структуры и теория дифракции на ней отсутствовали. Данные задачи представляют интерес вследствие зависимости свойств нанотрубок от их структуры с одной стороны, и из-за большого распространения спиральных трубок с другой.

Задача измерения параметров спиральных нанотрубок сводится к определению параметров решетки a , b , d , начального радиуса трубки (ρ_0) и угла хиральности (ε_c). Данные структурные параметры, как показала разработанная теория дифракции, легко определяются из картины дифракции электронов [2,3]. Параметры a , b , d определяются по рефлексам общего положения. В случае картины микродифракции электронов высокого разрешения параметр ρ_0 может быть определен из осцилляций профилей рефлексов, а угол хиральности ε_c – по расщеплениям диффузных ($hk0$) рефлексов. Идентификация конусных спиральных нанотрубок, а также измерение угла конусности ε_b проводится по расщеплению «базальных» рефлексов типа $00l$ [2].

В докладе приводится анализ микродифракционных картин высокого разрешения нанотрубок дисульфида вольфрама и дисульфида олова, полученных в рамках сотрудничества с Вайцмановским исследовательским центром, Израиль. Компьютерное моделирование дифракции электронов в кинематическом приближении показало хорошее соответствие модельных картин с экспериментальными дифракционными картинками.

1. I.K. Nasyrov, D.M. Pashin, Z.Y. Khalitov, D.N. Valeeva, Structure of chiral and spiral nanotubes of arbitrary composition, *Sci. Isr. - Technol. Advantages*. 12 (2010) 63–73.
2. D.M. Pashin, O. Figovsky, Z.Y. Khalitov, The Structure and Diffraction by Nanotubes, *Sci. Isr. - Technol. Advantages*. 15 (2013) 1–83.
3. O. Figovsky, D. Pashin, Z. Khalitov, A. Khadiev, The Quantitative Theory of Diffraction by Spiral Nanotubes, *Chem. Chem. Technol.* 8 (2014) 41–50.

Одномасштабное приближение нестандартной теории динамической рентгеновской дифракции для кристалла с деформацией решетки

Ю.П. Хапачев, А.А. Дышеков

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик, Россия

В [1, 2] развит нестандартный подход к аналитическому описанию волнового поля в условиях динамической рентгеновской дифракции в идеальном кристалле. Принципиальное отличие данного подхода состоит в том, что используется разложение волнового поля по Фурье-компоненте поляризуемости кристалла, соответствующей вектору обратной решетки. В математическом отношении развитая теория применяет современные методы теории возмущений (метод многих масштабов), позволяющие эффективно строить приближенные аналитические решения, пригодные в широком диапазоне изменения параметров задачи. Это позволяет анализировать дифракционное рассеяние для различных геометрий, включая предельно асимметричные и поверхностные, в рамках единого подхода.

В данной работе проводится обобщение нестандартной теории рентгеновской дифракции в кристалле с учетом деформаций решетки. При этом предполагается, что вектор смещения атомных плоскостей вводится в модель поляризуемости кристалла аналогично обобщенной динамической теории Такаги. Решение волнового уравнения ищется с помощью процедуры разложения амплитуды поля и векторных операторов по величине Фурье-компоненты поляризуемости согласно методу многих масштабов. Реализация такого подхода предполагает малость величины регулярного смещения атомных плоскостей на расстояниях порядка периода решетки. Это позволяет рассматривать область деформации в «медленном» масштабе изменения по отношению к периоду решетки. Для аналитического исследования дифракционного рассеяния применен метод многих масштабов, который дает систематическую основу для последовательного учета деформации решетки в зависимости от характера искажений решетки и геометрии дифракции.

В работе показано, что в общем случае учет искажений решетки требует рассмотрения различных характерных пространственных областей для уравнения дифракции. В частности, уравнения Такаги получаются в случае учета одного пространственного масштаба, имеющего порядок длины экстинкции для данного угла рассеяния.

1. А.А. Дышеков. Поверхность. №11. С.92-101 (2010).
2. А.А. Дышеков. Поверхность. №1. С.60-65 (2013).

**Исследование дефектной структуры нестехиометрических фаз
 $R_{0,85}Sr_{0,15}F_{2,85}$ ($R=Nd, Pr$)**

О.Н. Хрыкина, Т.С. Черная, Н.Б. Болотина, И.А. Верин, Б.П. Соболев

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Кристаллы бинарных систем $MF_2 - RF_3$ ($M^{2+} = Ca, Sr, Ba$; $R^{3+} - La - Lu, Y$, кроме Sc), относящиеся к суперионным проводникам по ионам фтора. Актуальной задачей является выяснение структурной обусловленности величин высокой фтор-ионной проводимости в кристаллах $R_{1-y}M_yF_{3-y}$ структурного типа тисонита (LaF_3), нелинейно зависящей от состава (y).

В настоящей работе изучено строение монокристаллов $Nd_{0,85}Sr_{0,15}F_{2,85}$ и $Pr_{0,85}Sr_{0,15}F_{2,85}$. Образцы выращены методом Бриджмена направленной кристаллизации расплава. Кристаллы не подвергались дополнительной термической обработке ("as grown"). Структурные данные получены на рентгеновском четырехкружном CCD-дифрактометре Xcalibur S Oxford Diffraction.

Твердые растворы с $R = La - Gd$ кристаллизуются в двух ячейках. «Малая» ($Z=2$) служит для описания гексагональной структуры с двумя независимыми позициями анионов F. «Большой» ($Z=6$) ячейкой описывают тригональную структуру с тремя независимыми позициями для анионов фтора. Установлено, что для кристаллов $Nd_{0,85}Sr_{0,15}F_{2,85}$ и $Pr_{0,85}Sr_{0,15}F_{2,85}$ характерна гексагональная пр. гр. $P6_3/mmc$ с «малой» ячейкой. Это соответствует известному факту, что при увеличении концентрации щелочноземельного элемента происходит переход из «большой» ячейки в «малую» [1].

Выявлено разупорядочение позиций атомов Nd/Sr и Pr/Sr, что может служить одной из причин снижения величины проводимости при повышении содержания SrF_2 в составе. Проводимость этих кристаллов, обусловленная при комнатной температуре вакансиями в анионной подрешетке, сравнима по порядку величины с проводимостью беспримесных кристаллов NdF_3 и PrF_3 , несмотря на структурное различие. Это дает новую информацию для построения гипотезы о механизмах фтор-ионной проводимости в кристаллах со структурой типа тисонита.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-02-31135 и гранта поддержки ведущих научных школ НШ-1130.2014.5

1. N.B. Bolotina, T.S. Chernaya, A.I. Kalukanov, I.A. Verin, N.I. Sorokin, B.P. Sobolev. Ion transport in defect structures of tysonite-like $La_{1-y}Sr_yF_{3-y}$ crystals. 18th International Symposium on the Reactivity of Solids ISRS-18, Saint Petersburg, June 9-13, 2014. Book of Abstracts. P. 122-123.

Загадка магнитной структуры $ZrZn_2$

А.В. Цвященко^{1,2}, Д.А. Саламатин^{1,3}, Л.Н. Фомичева¹, В.А. Сидоров¹,
А.В. Саламатин³, А.Величков³, А.В. Николаев², Г.К. Рясный²,
В.Н. Трофимов³, М. Budzynski⁴

¹ Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк, Россия

² Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, Москва, Россия

³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

⁴ Institute of Physics, M. Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

Соединение $ZrZn_2$ было впервые исследовано Маттиасом и Бозортом в 1950-х годах [1]. Они открыли, что соединение, состоящее из сверхпроводящих компонентов, является зонным ферромагнетиком. Соединение $ZrZn_2$ кристаллизуется в кубической структуре Лавеса (тип C15). Ферромагнетизм в соединении возникает ниже $T_C = 28.5$ К с моментом упорядочения $\mu_S = 0.17 \mu_B/\text{f.u.}$.

Методом возмущенных угловых гамма-гамма корреляций (ВУК) в соединении $ZrZn_{1.9}$ были измерены магнитные сверхтонкие поля в узлах Zr ($B_{Zr} = 9.2$ Т при $T = 4$ К) и Zn (индуцированное поле $B_{Zn} = 1.2$ Т при $T = 4$ К) при низких температурах и давлениях до 2 ГПа. Также был определен градиент электрического поля в узле Zn ($V_{zz} = v_Q h/eQ = 7.2(2) 10^{17}$ В/см² при $T = 4$ К). Из температурной зависимости магнитных сверхтонких полей (МСП) (см. Рис.1) был сделан вывод о том, что магнитный переход идет первым родом.

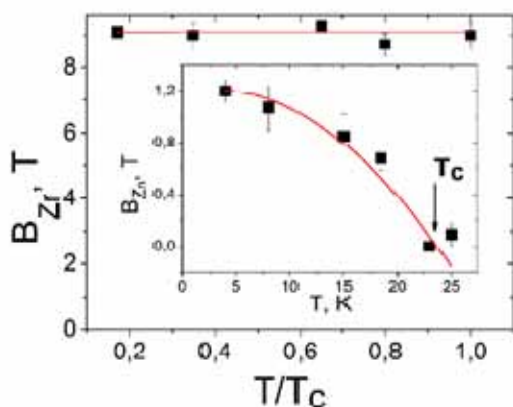


Рис. 1. Температурные зависимости магнитных сверхтонких полей $ZrZn_{1.9}$.

Из величин МСП и расчетов констант спаривания, полученных из *ab initio* расчетов [2] был определен магнитный момент на элементарную ячейку ($\mu \approx 1 \mu_B$), который существенно превышал значение момента, полученное из измерения намагниченности ($\mu_S = 0.17 \mu_B/\text{f.u.}$).

Из этого был сделан вывод о том, что в соединении возникает не простое ферромагнитное упорядочение.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-02- 00001 и Программ ОФН РАН (ФЭЧФЯФЯТ и ФССВ).

1. B.T. Matthias, R.M. Bozorth, Phys. Rev. 109, 604 (1958).

2. I.I. Mazin, to be published.

Кристаллическая структура и коэффициенты теплового расширения высокотемпературных сверхпроводников системы $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$

Л.А. Черепанова, С.Г. Титова, С.В. Пряничников

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Методом порошковой рентгенографии изучено влияние содержания кислорода и степени замещения $R = \text{Y}/\text{Ca}$, Y/Nd , $\text{Y}/\text{Nd}/\text{Eu}$ на кристаллическую структуру высокотемпературного сверхпроводника $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ в интервале температур 80 – 300 К. Рассчитанные по рентгенографическим данным коэффициенты теплового расширения (КТР) приведены на рис. 1.

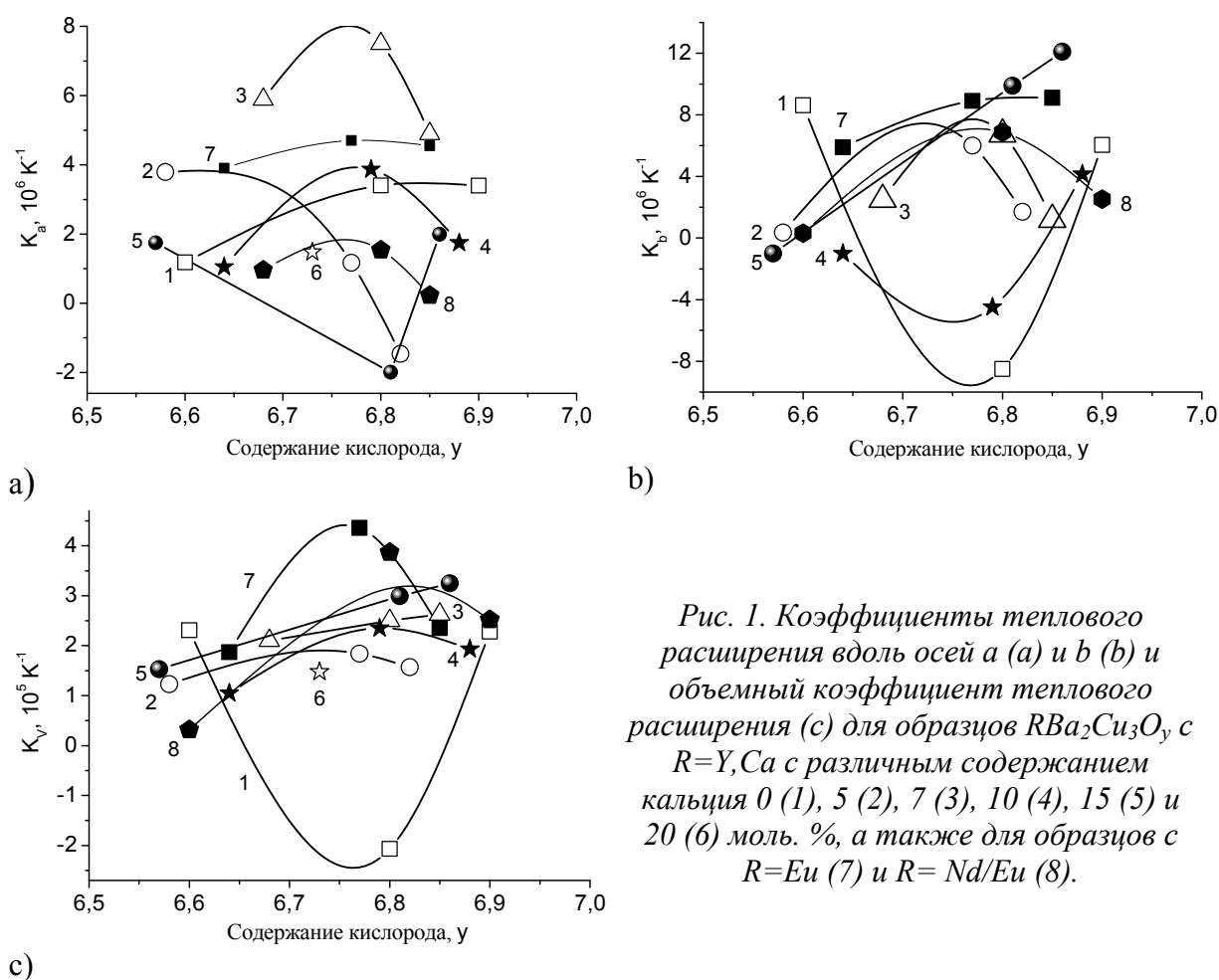


Рис. 1. Коэффициенты теплового расширения вдоль осей a (a) и b (b) и объемный коэффициент теплового расширения (c) для образцов $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ с $R = \text{Y}, \text{Ca}$ с различным содержанием кальция 0 (1), 5 (2), 7 (3), 10 (4), 15 (5) и 20 (6) моль. %, а также для образцов с $R = \text{Eu}$ (7) и $R = \text{Nd}/\text{Eu}$ (8).

Составы $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ с малым содержанием кальция $x < 0.15$ имеют линейный отрицательный КТР; в отсутствие кальция при содержании кислорода $y = 6.8$ наблюдается объемный отрицательный КТР. Составы с $R = \text{Eu}$ и $R = \text{Nd}/\text{Eu}$ обладают сравнительно невысоким постоянным линейным и объемным КТР, который слабо зависит от содержания кислорода, обладая при этом повышенной химической стабильностью, что делает их перспективными для использования в сверхпроводящих пленках.

**Разработка ДТМ - системы окружения образца
для дифрактометра ДН-12 на ИЯУ ИБР-2**

А.Н. Черников¹, С.А. Куликов¹, О. Куликов^{1,2}, И. Добрин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² National Institute for R&D in Electrical Engineering ICPE-CA, Bucuresti, Romania

В настоящее время дифрактометр ДН-12 реактора ИБР-2 оснащен горизонтальным криостатом для работы с камерами высокого давления в диапазоне температур (10 – 300) К. Представленный проект является модернизацией системы окружения образца ДН-12, которая позволит проводить эксперименты на ДН-12 одновременно с камерами высокого давления в диапазоне температур (300 - 3) К и магнитным полем до 4 Тл.

Система оборудована двумя криостатами. Первый криостат с криокулером замкнутого цикла предназначен для охлаждения сверхпроводящего магнита на основе ВТСП ленты второго поколения. В криостате предусмотрена шахта для установки второго криостата с криокулером замкнутого цикла для охлаждения камеры высокого давления, что позволяет производить перезагрузку камеры без отогрева магнита. Компоновка криостатов горизонтальная.

В докладе представлена концепция системы окружения образца с криостатами для камеры высокого давления и сверхпроводящего магнита и предварительные расчеты карты магнитного поля.

Пленки-вращатели поляризации для установок спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов

Ю.О. Четвериков¹, Л.А. Аксельрод¹, Е.В. Величко¹, М.С. Ласаков¹

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В работе представлены результаты работы по исследованию однородности и намагниченности толстых (около 3.0 мкм) магнитных пленок пермаллоя, напыленных на кремниевые подложки. Такие магнитные пленки планируется использовать в качестве вращателей поляризации для установки спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (новый метод измерения малоуглового рассеяния нейтронов в прямом пространстве). Пленки были изготовлены методом магнетронного напыления на кремниевую подложку. Средняя толщина пленок определялась методом взвешивания образцов-свидетелей. Измерения однородности толщины напыленного слоя проводились как оптическим микроскопом так и поверхностным профилемером. Аттестация магнитных свойств пленок (намагниченности и магнитной однородности) производилась методом трехмерного анализа поляризации нейтронного пучка.

В результате проведенной работы были созданы пленки с необходимой толщиной магнитного слоя. Отработана методика аттестации магнитных пленок для использования в качестве вращателей поляризации СЭМУРН установки. Измеренная магнитная однородность первых пленок оказалась не достаточной для использования на СЭМУРН установках. Проведены модификации метода напыления, которые позволят повысить однородность получаемых пленок до требуемого уровня.

**Локальные межспиновые взаимодействия
и магнитная структура хиральных магнетиков**

В.А. Чижиков, В.Е. Дмитриенко

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

В хиральных магнетиках конкуренция межспиновых взаимодействий (изотропный обмен, взаимодействие Дзялошинского–Мории [1,2] и др.) приводит к существованию макроскопических магнитных текстур, таких как различного рода спирали, скирмионные решётки [3,4] и, возможно, других, например гипотетических кубических структур, сходных с голубыми фазами ЖК.

На макроскопическом уровне эти текстуры описываются в рамках феноменологической теории Гинзбурга–Ландау [5], однако привлечение микроуровневого описания, например основанного на классической гейзенберговской модели, способно существенно увеличить число предсказываемых магнитных структур и стимулировать их экспериментальные поиски.

Недавно нами было предсказано [6-8], что на межатомном уровне исследуемые макроскопические магнитные текстуры должны обладать локальными особенностями, до сих пор практически не затронутыми экспериментом. Правильный учёт этих особенностей позволяет осуществить переход от микроскопических моделей к феноменологическому подходу, что может дополнительно стимулировать развитие методов *ab initio* вычислений констант межспиновых взаимодействий. Особенно плодотворным такой подход оказывается в случае мультиферроиков [9].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-02-00268 а) и Программ фундаментальных исследований Президиума РАН «Вещество при высоких плотностях энергии» и «Дифракция синхротронного излучения в мультиферроиках и хиральных магнетиках».

1. I. Dzyaloshinsky, J. Phys. Chem. Solids 4, 241 (1958).
2. T. Moriya, Phys. Rev. 120, 91 (1960).
3. С.М. Стишов, А.Е. Петрова, УФН 181, 1157 (2011).
4. S.V. Grigoriev, N.M. Potapova, E.V. Moskvina, V.A. Dyadkin, Ch. Dewhurst, S.V. Maleyev, Письма в ЖЭТФ 100, 238 (2014).
5. P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C: Solid State Phys. 13, L881 (1980).
6. V.E. Dmitrienko, V.A. Chizhikov, Phys. Rev. Lett. 108, 187203 (2012).
7. V.A. Chizhikov, V.E. Dmitrienko, Phys. Rev. B 85, 014421 (2012).
8. V.A. Chizhikov, V.E. Dmitrienko, Phys. Rev. B 88, 214402 (2013).
9. V.A. Chizhikov, V.E. Dmitrieno, arXiv:1305.5382.

**Особенности дифракции на нанотрубках с гофрированной
сверхрешеткой**

А.Е. Чканов, З.Я. Халитов, Д.М. Пашин

*Казанский национальный исследовательский технический университет - КАИ,
Казань, Россия*

После открытия в 1991 году углеродных нанотрубок интерес к исследованиям в этой области резко увеличился. Необычные электрические свойства нанотрубок делают их одним из основных материалов нанoeлектроники. Для описания электрических свойств нанотрубок необходимо знать их структуру. Решить проблему с описанием структуры могут методы просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). В последнее время синтезированы первые представители смешанослойных нанотрубок, в которых чередуются слои SnS_2 и SnS [1]. Среди них были впервые найдены «гофрированные» нанотрубки имеющие сверхпериод в продольном направлении. Данные нанотрубки представляют большой интерес для ученых, так как волнистая форма слоев, вероятно, должна привести к специфическим электрическим и колебательным свойствам.

В результате совместного исследования методами ПЭМ был обнаружен ряд дифракционных эффектов присущих данным структурам. Наряду с дифракционными эффектами присущими коаксиальным и спиральным нанотрубкам [2], по которым возможно определение практически полного набора структурных параметров (параметров решетки, угла хиральности и др.) было отмечено образование на дифракционной картине дополнительных слоевых линий. Было обнаружено, что расстояние между данными слоевыми линиями является обратной величиной от длины сверхпериода трубки.

В результате исследования SnS/SnS_2 нанотрубок были найдены определенные закономерности образования гофрированных решеток. Совместная работа привела к разработке модели структуры «гофрированной» нанотрубки, а также к исследованию влияния различных структурных параметров трубки на дифракционную картину [3]. Разработанная структурная модель применима для произвольных по химическому составу нанотрубок, имеющих «гофрированную» структуру.

1. G. Radovsky, R. Popovitz-Biro, M. Staiger, K. Gartsman, C. Thomsen, T. Lorenz, G. Seifert and R. Tenne, *Angew. Chem, Intl. Ed.* 50 (51), 12316-12320, (2011).
2. O. Figovsky, D. Pashin, I. Nasyrov, Z. Khalitov, D. Valeeva. *Chemistry & Chemical Technology*, 6, 1, 43-49, (2011).
3. O. Figovsky, D. Pashin, Z. Khalitov, D. Valeeva, A. Chkanov. *Chemistry & Chemical Technology*, 7, 3, 251-256, (2013).

Разработка двухкоординатного нейтронного монитора для измерения профилей пучков установок ИН-06 ИЯИ РАН

А.В. Чураков¹, А.В. Белушкин¹, В.С. Литвин², Р.А. Садыков², А.А. Столяров²

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

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

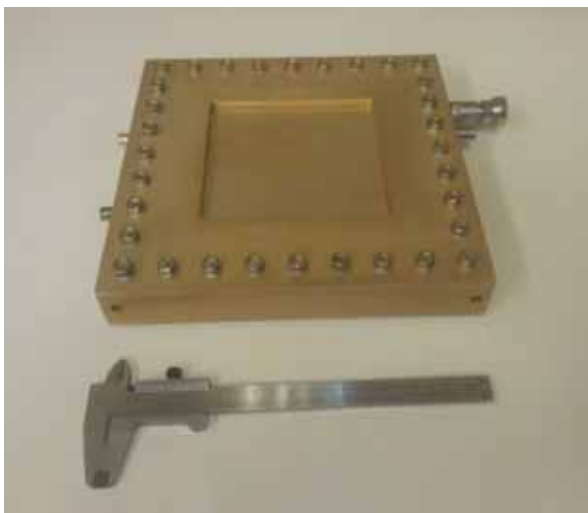


Рис 1: Двухкоординатный нейтронный монитор для измерения профилей пучков на источнике ИН-06

При постановке экспериментов на современных исследовательских источниках нейтронов часто возникает задача наблюдения профилей нейтронных пучков перед образцом, причем изменения, вносимые детектором в падающий пучок, должны быть минимальны. Специально разрабатываемые мониторы нейтронов [1] позволяют решить эту задачу.

Для измерения пространственного распределения пучков тепловых и холодных нейтронов источника ИН-06 был разработан двухкоординатный нейтронный монитор (рис.1). Прибор является совместной разработкой

Лаборатории Нейтронной Физики ОИЯИ, г.Дубна, и Лаборатории Нейтронных Исследований ИЯИ РАН. Монитор позволит контролировать профиль падающего на образец пучка и положение образца. Это особенно важно, когда положение образца невозможно контролировать визуально, например, при использовании криостата, печи или камер высокого давления для создания условий на образце. Чувствительная область прибора составляет 100×100 мм². Эффективность монитора к тепловым и холодным нейтронам можно варьировать в широком диапазоне, изменяя состав газовой смеси. Входное и выходное окно монитора являются сменными, что позволяет работать не только в тепловой области, но и в холодной области, с тонким входным окном.

Данный монитор предназначен для использования на нейтронном рефлектометре с малоугловой опцией «Горизонт» на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН. Также монитор может применяться на других нейтронографических установках на импульсных источниках нейтронов ИН-06 и РАДЭКС в ИЯИ РАН.

1. А.В.Белушкин, А.А.Богдзель и др. , Журнал технической физики, 121-125, 1 (2008).

Квантовая спиновая жидкость в магнитных изоляторах нового типа

В.Р. Шагинян

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Сильнокоррелированные ферми-системы являются фундаментальными системами в физике и представлены металлами с тяжелыми фермионами, высокотемпературными сверхпроводниками, квазикристаллами и двумерными фермионными системами. Однако это далеко не полный список. Спиновые квантовые жидкости, как показывают недавние экспериментальные и теоретические исследования, принадлежат к сильнокоррелированным ферми-системам. Экзотическая квантовая спиновая жидкость состоит из спинов, являющимися квазичастицами со спином $1/2$ и нулевым зарядом. Недавние эксперименты на магнитных изоляторах с почти плоской зоной, содержащей спиноны, проливают свет на природу квантовой спиновой жидкости, составленной из спинов. Мы представляем теорию термодинамических, релаксационных и транспортных свойств квантовой спиновой жидкости и объясняем, как эти свойства зависят от магнитного поля и температуры. Дано описание современных экспериментальных данных. Показано, что магнитные изоляторы ведут себя как металлы с тяжелыми фермионами, низкотемпературная термодинамика, транспорт и релаксационные свойства которых определяется спиновой квантовой жидкостью. Магнитные изоляторы представляют новый тип сильнокоррелированных изоляторов и магнитов: их теплоемкость линейна по температуре, а магнитный порядок отсутствует при нулевой температуре. Другими словами, изолятор сохраняет все свойства твердого тела, а магнитная спиновая жидкость сохраняет текучесть. Таким образом, электрические изоляторы обладают свойствами металлов с тяжелыми фермионами за одним исключением: они не проводят электрический ток.

1. V.R. Shaginyan, M.Ya. Amusia, A.Z. Msezane, and K.G. Popov, Phys. Rep. 492, 31 (2010).
2. V.R. Shaginyan, A.Z. Msezane, and K.G. Popov, Phys. Rev. B 84, 060401(R) (2011).
3. V.R. Shaginyan, A.Z. Msezane, K.G. Popov, G.S. Japaridze, V.A. Khodel, Europhys. Lett. 103, 67006 (2013).

Study of the Ru-based compounds important for catalysis with DFT modeling and Cl K-edge XANES spectroscopy

I. Alperovich^{1,2}, L. Yan¹, D. Moonshiram¹, Y. Pushkar¹

¹ *Purdue University, Department of Physics, West Lafayette, Indiana, United States*

² *Southern Federal University Research Center for Nanoscale structure of Matter, Rostov-on-Don, Russian Federation*

One of the most urgent scientific challenges is capturing solar energy in a man-made device mimicking the natural photosynthesis process. If implemented efficiently enough, that would solve the energy problem in an environmental-friendly fashion. There are many trends in the way of making this goal reality. Studying mono- and di-Ru based catalysts for water oxidation is one of them aiming at the understanding of the complex chemical reaction of the splitting water into oxygen and hydrogen.

We applied Density functional theory theoretical modeling augmented with Cl K-edge X-ray absorption near edge structure (XANES) spectroscopy in order to research the Ru oxidation state and catalytic pathway. The obtained results indicate the power of the used techniques and elucidate metal center coordination of the reaction intermediates.

Dynamical properties and phase transition in $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ studied by vibrational spectroscopies (IR and IINS)

J. Hetmańczyk^{1,2}, E. Szostak², A. Migdał-Mikuli²

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

² *Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Kraków Poland*

Hexadimethylsulfoxidemanganese(II) chlorate(VII) is a particularly interesting molecular material, because of the occurrence of reorientational motions of the DMSO ligands, ClO_4^- anions and entire $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6]^{2+}$ complex cations. The vibrational spectra of the $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ are investigated by means of inelastic neutron scattering spectroscopy together with density functional theory calculations.

At room temperature (RT) hexadimethylsulfoxidemanganese(II) chlorate(VII) crystallizes in an orthorhombic system (space group Fdd2, No. 43) [1]. Single crystal X-ray diffraction studies of $[\text{Mn}(\text{OS}(\text{CH}_3)_2)_6](\text{ClO}_4)_2$ have shown that the low temperature phase transition, detected by differential scanning calorimetry (DSC) at about 223 K, is associated with the crystal symmetry reduction from an orthorhombic crystallographic system (Fdd2, No. 43) to a monoclinic one (Cc, No. 9) [2]. The results of inelastic, quasi-elastic incoherent neutron scattering and neutron powder diffraction measurements carried out for $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ between 5–298 K are reported. The IINS spectra obtained at 295 K, 240 K and 200 K are very diffused. The QENS data registered at 5 K, 200 K and 240 K does not show any broadening. This implies that, taking into account the resolution of the NERA spectrometer, the reorientation of methyl group in DMSO ligands does not exist or is much slower below accessible time window. This is rather surprising behavior. However, at the room temperature, small quasielastic broadening is visible, what implies that $-\text{CH}_3$ groups start to perform faster reorientational motion. It seems that reorientations of this group is hindered maybe because of hydrogen bonds. Changes observed in neutron diffraction patterns NPD confirm that the discovered phase transition is associated with a change of the crystal structure. We have also performed quantum chemical calculations of normal modes using periodic boundary conditions (CASTEP code [3]). We have obtained a good agreement between calculated and experimental data (IR and IINS spectra).

1. A. Migdał-Mikuli, E. Szostak, W. Nitek, Acta Cryst. m2581, E 62 (2006).

2. E. Szostak, A. Migdał-Mikuli, A. Kaczor, W. Nitek, Spectrochim. Acta A 1179, 79 (2011).

3 S.J. Clark, M.D. Segall, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, M.J. Probert, K. Refson, M.C. Payne, Z. Kristallogr. 567, 220 (2005).

**Structural and vibrational spectroscopy study of bromanilic acid:
2,3,5,6-tetramethylpyrazine complex**

K. Łuczyńska^{1,2}, K. Druźbicki^{2,3}, K. Lyczko¹

¹*Institute of Nuclear Chemistry and Technology, Warsaw, Poland*

²*Joint Institute for Nuclear Research, FLNP, Dubna, Russian Federation;*

³*Adam Mickiewicz University, Department of Radiospectroscopy, Faculty of Physics, Poznan, Poland*

Complementary structural and vibrational spectroscopy study of bromanilic acid : 2,3,5,6-tetramethylpyrazine (BrA : TMP) 1:1 cocrystal is reported. The crystallographic structure was determined by means of single-crystal X-ray diffraction and can be described as a stacked net of hydrogen-bonded $\text{TMPH}^+\cdots\text{BrA}^-\cdots\text{BrA}^-\cdots\text{TMPH}^+$ moieties. The complementary vibrational analysis was performed by combining optical (infrared, Raman, terahertz) and inelastic neutron scattering spectroscopy with the *state-of-the-art* solid-state density functional theory (DFT) computations, which have proven to be superior to hybrid cluster modeling approach. An excellent agreement between theoretical and experimental data was observed in the whole spectral range, allowing for deep understanding of the vibrational properties. While the primary hydrogen-bonding interactions are limited to the above quoted structural units, the system revealed a very little dispersion of the phonon branches, manifested mainly in the intermolecular vibrations range. Moreover, the studied phase does not exhibit any mechanical instability, which could suggest a displacive structural transformation tendency.

**EXAFS-исследование наноразмерного катализатора Pt/Ce(La)O_x
для окисления CO**

Л.А. Авакян¹, Н.А. Колпачева¹, В.В. Срабионян¹, Л.А. Бугаев¹, J. A. van Bokhoven², J. Singh²

¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

² ETH Zurich, Institute for Chemical and Bioengineering, Zurich, Switzerland

Задача окисления монооксида углерода (CO) до двуоксида (CO₂) традиционно была связана с безопасностью двигателей, сжигающих топливо, поскольку CO ядовит, он необратимо связывает активный центр гемоглобина. Сегодня для водородных двигателей необходимо ещё сильнее очищать поток водорода от угарного газа, наличие которого хотя бы ~ 1 % уже заметно портит дорогостоящую водородную мембрану. Для проведения такого доокисления сейчас разрабатываются катализаторы, работающие в т. н. режиме PROX (preferential oxidation: $2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$), поскольку более доступная реакция (WGS = water-gas shift: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$) не может опустить содержание CO менее 1 %.

В качестве PROX катализаторов обычно выступают наночастицы благородных металлов различных размеров, осажденные на различных подложках. В данной работе рассматриваются платиновые наночастицы, чрезвычайно малых размеров, не превышающих 2 нм [1]. В качестве подложки выступает допированный лантаном оксид церия, который известен своей способностью запасать и отдавать кислород.

Несмотря на существование работающих катализаторов, до сих пор ведутся споры относительно активных центров окисления, в качестве которых могут выступать как атомы металла Pt⁰ на гранях наночастиц (как это происходит в объемных катализаторах), либо на ребрах и вершинах, где атомы платины имеют меньшее число соседей и являются более активными. Возможными активными центрами также являются ионы Pt²⁺, окисленные кислородом подложки или атмосферы. Для выяснения природы активных центров очень ценной оказывается информация об атомной структуре получаемая с помощью анализа EXAFS спектров.

В данной работе изучаются EXAFS спектры платины в Pt/Ce(La)O_x в гелиевой (пассивной) атмосфере при комнатной температуре. Для анализа используются фазы и амплитуды рассеяния, рассчитанные методом Хартри-Фока [2]. Одной из интерпретаций полученных результатов является внедрение атомов платины в матрицу с образованием оксидных комплексов Pt-O-Ce.

1. J. A. van Bokhoven; C. Paun, J. Singh J. Phys. Chem. C, 118, 13432 (2014).

2. L. Bugaev, V. Shuvaeva, I. Alekseenko, K. Zhuchkov, R. Vedrinskii Phys. Solid State, 40, 1001 (1998).

Нейтроннографическое и синхротронное исследование глобулярных фотонных кристаллов

С.С. Агафонов, В.А. Соменков, В.П. Глазков, Е.С. Коваленко, М.Н. Шушунов

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Естественные и искусственные опалы представляют собой упаковки кварцевых сфер, диаметром много больше межатомных расстояний в кварце. Они содержат некоторое количество воды и относятся к классу фотонных кристаллов. Известно, что кварц под действием температуры и давления имеет много полиморфных превращений (α -, β -кварц, тридимит, α -, β -кристобалит при изменении температуры, коэсит и стишовит при высоких давлениях).

Для определения крупно- и мелкомасштабных структурных характеристик синтетических опалов использовали малоугловую нейтронную и синхротронную дифракцию и нейтронную дифрактометрию. Малоугловое рассеяние изучали на нейтронном спектрометре СТОИК, на реакторе ИР-8 и станциях Медиана и СТМ Курчатовского источника синхротронного излучения, а дифрактометрию на многодетекторном нейтронном дифрактометре ДИСК.

По данным малоугловой нейтронной и синхротронной дифракции выявляются пики на углах рассеяния порядка нескольких десятков угловых секунд. Они соответствуют образованию двумерной треугольной (гексагональной) сверхрешетки с периодом, равным $\sim 2000\text{\AA}$, близким к периоду световой волны.

Мелкомасштабное строение опалов определяли методом нейтронной дифрактометрии. На нейтронограммах видны несколько аморфных гало, соответствующие линиям только одной модификации SiO_2 , а именно наиболее высокотемпературной модификации- β -кристобалиту. Если бы эти опалы были бы на кварцевой, а не на кристобалитной основе, то гало на нейтронограмме соответствовали бы таковым для плавленного кварца на месте сильнейших линий α - кварца.

Это подтверждается данными микрокалориметрии и гравиметрии, то есть не обнаружено никаких фазовых превращений, кроме тех, которые сопровождаются потерей массы (при 200° и 800° С) и связаны, очевидно, с потерей воды. При отжиге (800° и 1000° С) происходит изменение окраски синтетических опалов с белой (или бледно-розовой) до темно-синей при сохранении иризации.

В некоторых случаях, в зависимости от режима термообработки, в синих опалах возникают черные области, а на нейтронограммах появляются дополнительные дифракционные линии, соответствующие β -кристобалиту и свидетельствующие о частичной кристаллизации опалов, причем в температурной области, в которой существование кристаллического кристобалита термодинамически нестабильно. Это лишний раз доказывает кристобалитный характер изученных синтетических опалов.

Исследование комплексов из больших и малых белков теплового шока в растворе методом малоуглового рентгеновского рассеяния*С.В. Амарантов, В.В. Волков**Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

Исследовались комплексы бактериального GroEL и вирусного (фаговый) GP146 шаперонинов, образованные из мономеров «большого белка теплового шока» Hsp60, а также белок альфа-кристаллин хрусталика глаза, состоящий из αA и αB субединиц принадлежащих к семейству «малых белков теплового шока» sHsp. В отличие от бактериальных шаперонинов, вирусные имеют значительно меньшую степень гомологии (степень гомологии бактериальных GroEL с GP146 фага EL только 21%). Поэтому был интерес сравнение конформации макромолекул GP146 и GroEL в растворе.

Для моделирования формы вирусных и бактериальных шаперонинов в растворе по кривым малоуглового рассеяния, предполагалось, что формы этих частиц можно описать формфакторам двойного эллиптических торов [1,2]. Неоднородность плотности макромолекулы задавалась через фрактальную размерность для функции радиальной плотности внутри частицы: $\rho(r) dV \sim \rho(r) \cdot r^{D-1} dr$ где $2 \leq D \leq 4$.

Поскольку для осуществления конформационных перестроек, шаперонины используют энергию получаемую при связывании и гидролизе АТФ, нами по кривым малоуглового рассеяния была сделана попытка определить изменение конформации макромолекулы в присутствии АТФ.

Другим белком, обладающим шапероноподобными свойствами и способным тормозить агрегацию некоторых белков, вызванную действием тепла является белок хрусталика глаза α -кристаллин, в растворе он присутствует в виде крупных моно- и полидисперсных олигомерных комплексов (300-800) кДа. Для них по кривым рассеяния было получено распределение частиц по размерам в предположении сферической и эллиптической форм макромолекул. Считая раствор белка слабо полидисперсным был получен набор моделей формы белка α -кристаллина в растворе. Также были получены температурные зависимости интенсивности рассеяния. В рамках неоднородного, для плотности частицы, подхода был осуществлён поиск радиального распределения плотности $\rho(r)$ внутри частицы при заданной форме. В этом случае форма частицы предполагалась сферой или эллипсоидом вращения.

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.140, вып.2(8), с.368-386.

**Программный продукт для on-line обработки
экспериментальных данных спектрометра ДИН-2ПИ**

И.И. Анисимов, А.В. Пучков

ФГУП ГНЦ РФ – ФЭИ им. А. И. Лейпунского, Обнинск, Россия

Список современных программных продуктов, которые могут быть использованы для визуализации и первичной обработки экспериментальной информации, получаемой на спектрометрах неупругого рассеяния медленных нейтронов, обширен. Однако, их адаптация для использования на спектрометре ДИН-2ПИ требует существенных доработок. Кроме того, такое программное обеспечение, как правило, является платным. В результате анализа современных бесплатных программных продуктов было принято решение реализовать обработку экспериментальных данных на основе библиотеки ROOT. В настоящее время разработана первая версия приложения, в которой реализованы стандартные процедуры обработки данных, позволяющие выполнять on-line обработку экспериментальных спектров до уровня динамического структурного фактора $S(Q, \omega)$.

Следующая версия приложения будет учитывать конструкционную особенность спектрометра ДИН-2ПИ – дискретный диапазон углов детектирования и наличие, вследствие этого, «мертвых» зон в области динамических переменных. Такое ограничение существенно снижает полноту экспериментальной информации и полноту анализа исследуемого явления. Поэтому предлагается получить информацию в непрерывном диапазоне динамических переменных путем проведения 2-х экспериментов с одним и тем же образцом, но с двумя различными значениями начальной энергии нейтронов. Правильный выбор значений начальной энергии должен обеспечить перекрытие исследуемых диапазонов передач импульса и энергии. Проблема состоит в объединении информации, полученной в разных экспериментах. Решение этой проблемы потребует разработки способов оптимального использования данных, полученных с различным разрешением и статистической точностью, и решения задач экстраполяции экспериментальных значений. Результатом разработки такой методики станет возможность получения динамического структурного фактора исследуемого вещества в виде карты интенсивности в непрерывном диапазоне динамических переменных, ограниченном минимальным и максимальным углами рассеяния нейтронов.

1. Спектрометр неупругого рассеяния нейтронов ДИН-2ПИ. Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка. URL: <http://flnp.jinr.ru/157/>.

2. Анисимов И.И., Пучков А.В. Программный продукт для on-line обработки экспериментальных данных спектрометра ДИН-2ПИ.: Препринт ФЭИ – 3247. - 2014.- Обнинск.- 32 с.

Кристаллические и молекулярные структуры новых оловоорганических соединений с антиоксидантными группами

*Т.А. Антоненко, Д.Б. Шпаковский, Ю.А. Грачева, Д.В. Альбов,
Л.А. Асланов, Е.Р. Милаева*

Московский государственный университет, Москва, Россия

Способность оловоорганических соединений накапливаться в клетке, а также их высокая токсичность позволяет рассматривать эти соединения в качестве перспективных цитостатических препаратов. Токсичность обусловлена связыванием атома Sn с SH-группами белков, так же, как и индуцированием окислительного стресса организма. Производные 2,6-ди-*трет*-бутилфенолов широко используются в промышленности как антиоксиданты и в медицине в качестве миметиков витамина E.

Целью настоящей работы являлось изучение взаимосвязи «структура-активность» серии оловоорганических соединений $\text{Me}_2\text{Sn}(\text{SR})_2$ (1), $\text{Ph}_2\text{Sn}(\text{SR})_2$ (2), $\text{R}_2\text{Sn}(\text{SR})_2$ (3), Ph_3SnSR (4) $\text{RCH}[\text{P}(\text{O})(\text{OEt})_2]_2 \cdot 2\text{Me}_2\text{SnCl}_2$ (5), $\text{RC}[\text{P}(\text{O})(\text{OEt})_2]_3 \cdot \text{Et}_2\text{SnCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (6) (где R = 3,5-ди-*трет*-бутил-4-гидроксифенил). Соединения 1-4 [1] в твердом состоянии являются ковалентными мономерами с искаженной тетраэдрической координацией атома Sn; 2,6-ди-*трет*-бутил-4-меркаптофенольные фрагменты координированы через атом S. Обнаружено, что координационными полиэдрами вокруг Sn центра в соединениях 5 и 6 являются тригональная бипирамида и октаэдр, соответственно, связь металл-лиганд осуществляется за счет координации с фосфоновым фрагментом.

Окисление 1-6 изучено методом ЭПР. Исследована антирадикальная активность оловоорганических производных 2,6-ди-*трет*-бутилфенолов с помощью теста, заключающегося в способности соединений восстанавливать стабильный радикал 2,2-дифенил-1-пикрилгидразил (ДФПГ). Продемонстрирована высокая антирадикальная активность полученных соединений. Результаты ДФПГ-теста показали, что активность зависит от присутствия атома олова и количества фенольных групп в молекулах. При этом самая высокая антирадикальная активность была обнаружена для комплекса 3, содержащего четыре антиоксидантных группы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-13-00483).

e-mail: taisiya.antonenko@mail.ru

1. D.B. Shpakovsky, C.N. Banti, E.M. Mukhatova, Yu.A. Gracheva, V.P. Osipova, N.T. Berberova, D.V. Albov, T.A. Antonenko, L.A. Aslanov, E.R. Milaeva, S.K. Hadjikakou., Dalton Trans., 2014, 43, 6880-6890.

Исследование радиационных эффектов в корунде с применением синхротронного излучения

В.В. Арутюнян, Е.М. Алексанян, Э.А. Ахвердян, Н.Е. Григорян

Ереванский физический институт, Ереван, Армения

Кристаллы окиси алюминия - лейкосапфир (α - Al_2O_3) имеют большое как научное, так и практическое значение и применяется в оптоэлектронике, в термоядерных реакторах, в сцинтилляционных детекторах и т.д.

Проблема повышения радиационной стойкости монокристаллов корунда (α - Al_2O_3) всегда вызывала огромный интерес для изучения природы и механизмов образования радиационных дефектов как точечных, так и сложных, часть из которых превращаются в центры окраски, т.е. в дефекты, которые способны поглощать или излучать кванты в ультрафиолетовой (УФ), вакуумноультрафиолетовой (ВУФ), видимой и инфракрасной областях спектра.

Целью данной работы является, исследование влияния структурных превращений в виде центров окраски, ответственных за проявление эффекта “радиационной памяти” с применением синхротронного излучения (СИ).

Объектами исследований являлись образцы номинально чистых (нелегированных) монокристаллов корунда (α - Al_2O_3), выращенных различными методами – методом горизонтально-направленной кристаллизации, Вернейля. Концентрации неконтролируемых примесей в шихте составляли в массовых процентах: Cr_2O_3 - $3 \cdot 10^{-3}$; Ti_2O_3 - 10^{-4} ; Ca , Fe , Ni - 10^{-3} . Облучение образцов высокоэнергетичными электронами с энергией 50 МэВ, с дозой 10^{17} эл/см² приводит к увеличению коэффициента поглощения во всем спектре. После облучения рентгеновскими квантами – СИ с энергией $h\nu \sim 12$ кэВ с различной временной экспозицией имеет место изменение интенсивности спектров полос поглощения. Установлено, что уменьшение интенсивности полос F^+ -центра (230 нм, 255 нм) по сравнению с F -центром происходит из-за того, что при облучении жесткими СИ-фотонами в корунде возникают свободные электроны и дырки. Часть электронов и дырок захватываются одиночными и агрегатными ЦО, полосы которых лежат в близкой УФ, видимой областях спектра, а остальная часть – F - и F^+ -центрами. На основании экспериментально наблюдаемых закономерностей предложен механизм проявления эффекта “радиационной памяти” в монокристаллах корунда, сущность которого заключается в том, что после электронного облучения, термоотжига при высоких температурах и повторного облучения рентгеновскими квантами СИ происходит восстановление максимумов полос поглощения или центров окраски – F , F^+ , $[\text{Al}_i^+ \text{F}]$.

Использование сканирующего рентгенофлуоресцентного анализа с синхротронным излучением для изучения палеотайфунов

А.С. Астахов¹, А.В. Дарьин², И.А. Калугин²

¹ Тихоокеанский океанологический институт ДВО РАН, Владивосток, Россия

² Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия

Тропические ураганы (тайфуны) являются одним из наиболее опасных природных явлений, для оценки возможного ущерба от которых обычно используется анализ масштабов катастроф в прошлом. Для восточного побережья Северной Америки разработана методика, основанная на изучении состава слоев осадков накопившиеся в прибрежных озерах, болотах, соляных маршах под действием экстремальных штормов, сопровождающих тайфуны [1]. На побережьях Тихого и Индийского океанов такой подход не нашел применения из-за подобного эффекта от действия цунами.

Предлагается иной метод обнаружения следов палеотайфунов, по присутствию в шельфовых отложениях слоев, накопившихся во время катастрофических наводнений, вызванных тропическими ураганами. Реализация его оказалась возможной благодаря использованию оригинальной установки сканирующего рентгенофлуоресцентного микроанализа с использованием в качестве источника возбуждения синхротронного излучения из накопителя ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН [2]. Она позволяет определение более 25 элементов (от Cl до Nb по K-сериям, Pb, Th, U – по L-сериям) с пределами обнаружения до 5×10^{-5} % при пространственном разрешении до 0,1 мм. Изучались осадки Амурского залива Японского моря, средняя скорость накопления которых, судя по распределению ^{210}Pb и ^{137}Cs , была 3-5 мм/год. При сканировании с шагом 0,5 мм выявлены слои осадков толщиной 3-8 мм с очень низким содержанием брома, по времени накопления сопоставимые с катастрофическими наводнениями на побережье. Они сложены осадочным материалом, вынесенным с суши и не содержащим морское органическое вещество, являющееся основным накопителем в природных условиях брома и йода.

Эти индикаторы, а также рентгеновскую плотность осадка, как показатель различной кристаллизационной структуры, предлагается использовать для выявления следов катастрофических наводнений в прошлом, в том числе вызванных прохождением тайфунов.

Работа выполнена в рамках интеграционного проекта СО РАН и ДВО РАН (гранты СО РАН 34 и 12-П-СО-07-021)

1. Liu K.-B., Lu H., Shen C., Quaternary Research, 71 (2009).

2. Дарьин А.В., Калугин И.А., Ракшун Я.В., Известия РАН. Серия физическая. 77, 2 (2013).

Искажения локальной атомной структуры твердых растворов по данным EXAFS спектроскопии: эксперимент, решение системы двух интегральных уравнений и математическое моделирование

Ю.А. Бабанов, Д.А. Пономарев, В.В. Устинов

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Серия твердых растворов с кристаллической структурой каменной соли

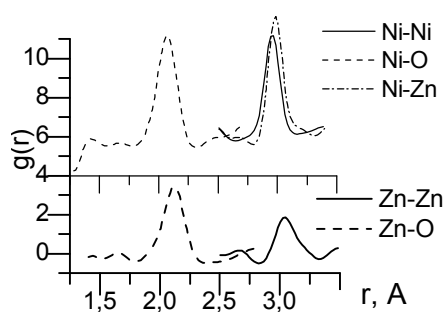


Рис. 1. Парциальные ПКФ для $KC-Ni_{0,3}Zn_{0,7}O$

(КС) $Ni_xZn_{1-x}O$ ($x = 0,0, 0,3, 0,5, 0,7, 1,0$), принадлежащая к семейству широкозонных полупроводников с сильным характером ионных химических связей, была синтезирована в МГУ из бинарных оксидов при давлении 7,7 ГПа и температурах 1450 -1650 К [1]. Дифракционные и EXAFS измерения для этих растворов проводились с использованием синхротронного излучения (РНИЦ "Курчатовский институт", Москва). Зависимость параметра решетки от концентрации подчиняется правилу Vegarda. Существует серьезная

проблема при получении информации о локальном порядке для систем,

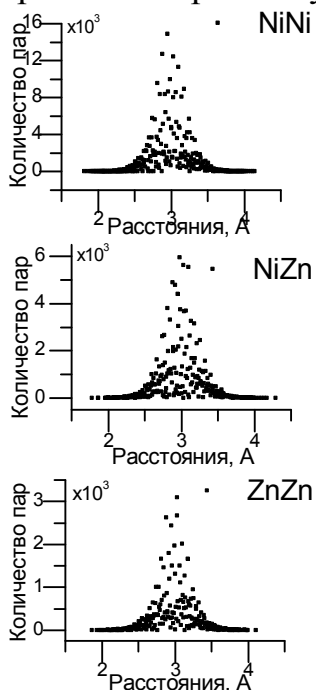


Рис. 2. Распределение пар для твердого раствора $Ni_{0,3}Zn_{0,7}O$

таких как $Ni_xZn_{1-x}O$, для которых характерно перекрытие в реальном пространстве координационных сфер. Для получения парциальных корреляционных функций (ПКФ) (Ni-Ni, Ni-Zn, NiO, Zn-Zn, Zn-O) решалась система двух интегральных уравнений Фредгольма для Ni и Zn EXAFS спектров (см. Рис.1). Эта задача является некорректно поставленной и для ее решения использовался метод регуляризации [2]. Показано, что кристаллическая решетка каменной соли в этих растворах искажается и дальний порядок существует только в среднем и не совпадает с локальным порядком.

На рис.2 приведены результаты моделирования твердого раствора $Ni_{0,3}Zn_{0,7}O$ (модель Полинга). Поскольку катионы (Me: Ni, Zn) и анионы O являются ближайшими соседями, то в каждой ячейке, начиная с выбранной, необходимо разместить все ионы O и Me на расстояниях, равных сумме радиусов ионов ($rO^{2-} = 1,40 \text{ \AA}$ и $rZn^{2+} = 0,74 \text{ \AA}$) и ($rO^{2-} = 1,40 \text{ \AA}$ и $rNi^{2+} = 0,69 \text{ \AA}$). Вид распределения свидетельствует о

существовании ограниченного хаоса в системе оксидных твердых растворов.

[1] A.N. Baranov, P.S. Sokolov *et al*, *High Press. Res.* 2008 28 , 515-519.

[2] А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. Решение некорректных задач. - М.: Наука. 1979.

**Microstructure features of new
CoFe₂O₄/lauric acid/DDC-Na/H₂O ferrofluid**

A.M. Balasoiu-Gaina^{1,5}, M. Balasoiu^{1,2}, O. Ivankov¹, D. Soloviov^{1,3}, S. Lysenko⁴,
R. Yakushev⁴, N. Lupu⁶

¹Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

²Horia Hulubei National Institute for Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Romania

³Taras Shevchenko University, Kiev, Ukraine

⁴Institute of Technical Chemistry Ural Branch of RAS, Perm, Russia

⁵CMCF, Moscow State University, Moscow, Russia

⁶Technical Physics Institute, Iasi, Romania

In the present paper results on concentration effects investigation in a new CoFe₂O₄/lauric acid/DDC-Na/H₂O ferrofluid sample by means of small angle neutron scattering (SANS), transmission electron microscopy (TEM) and selected area electron diffraction (SAED) are presented.

SANS experiments were performed at the time-of-flight YuMO spectrometer in function at the high flux pulse IBR-2 reactor, JINR Dubna. TEM analysis was carried out on a LEO 912 AB OMEGA transmission electron microscope with an accelerating voltage of 120 kV (Advanced Technology Centre, Moscow).

The analysis of CoFe₂O₄ particles from TEM image revealed a lognormal size distribution and a mean size value of $\langle D \rangle = 8.48$ nm. The overall shape of the particles was determined with the aid of the programs GNOM, DAMMIF, DAMAVER from the package ATSAS from the experimental scattering curve. In the case of methods that generates 3D structures from the 1D scattering data, the resulting pattern is not unique, but in present case the identified 3D object resembles closely the triaxial ellipsoid model obtained with FITTER program.

Обработка кристаллов CdTe и твердых растворов на его основе с получением параметра шероховатости менее 2 нм при использовании йодсодержащих травителей

И.С. Волчков, М.Д. Павлюк, В.М. Каневский и М.П. Зыкова

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Благодаря уникальной комбинации свойств теллурид кадмия широко используется в радиационной дозиметрии, акусто- и оптоэлектронике, средствах телекоммуникации, солнечной энергетике, для изготовления детекторов γ -излучения, неохлаждаемых детекторов и спектрометров рентгеновского излучения, в приборах нелинейной оптики. Однако в противовес уникальной комбинации свойств широкое применение этих материалов сдерживается как наличием фазовых переходов, так и сложностями в их обработки.

Для химической обработки CdTe и твердых растворов на его основе чаще всего используются бромсодержащие травильные смеси, среди которых самыми распространенными являются растворы Br_2 в CH_3OH . Высокое качество обработанных такими травителями поверхности [1] позволяет считать его одним из наиболее универсальных, однако существенная токсичность компонентов заставляет искать новые, менее токсичные травильные композиции.

Оптимизированы составы полирующих травителей $\text{KIO}_3 + \text{KI} + \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$ и $\text{KIO}_3 + \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O}$ и режимы проведения операции химико-механического полирования (ХМП). Показано, что обработка оптимизированными травильными композициями методом ХМП монокристаллов CdTe и твердых растворов на его основе позволяет достигнуть параметра шероховатости поверхности менее 2 нм, а также образцы характеризуются низкими токами при повышенных напряжениях, подаваемых на образец, что свидетельствует о незначительной концентрации поверхностных дефектов и подтверждает качественную обработку поверхности образца. Это дает предпосылки к использованию таких образцов в качестве x - и γ - детекторов.

1. В.М. Каневский, Ю.М. Иванов, А.Н. Поляков, М.Д. Зенкова и др., Поверхность. 12, 12 (2006).

Система удаленной автоматизации установок, сбора и обработки данных

И. Д. Милов, А. В. Гладкая, В. В. Пиядов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

В настоящее время автоматизация большинства экспериментальных установок осуществляется по следующему принципу – каждой установкой управляет отдельный компьютер, на который установлено соответствующее программное обеспечение (ПО). У такого подхода существует два недостатка: во-первых, для сбора данных необходимо непосредственное присутствие экспериментатора на установке, во-вторых, ПО для каждой установки имеет собственную специфику и интерфейс, необходимые для изучения.

В данном проекте предлагается принципиально новый подход, основанный на удаленной работе с экспериментальными установками. Взаимодействие пользователя и установки осуществляется через web-интерфейс: используя браузер, пользователь авторизуется в системе компьютерной алгебры Sage (Sage Notebook) через протокол LDAP (Lightweight Directory Access Protocol) и получает права доступа, определенные администратором. Далее, для работы с установками используются унифицированные команды. Система Sage позволяет обрабатывать полученные данные в реальном времени, сохранять результат и передавать файлы другим пользователям.

Для взаимодействия с приборами с помощью такой системы в архитектуру установки вносятся необходимые изменения. В отличие от общепринятой ситуации "установка-компьютер", используются одноплатные компьютеры, отвечающие за работу отдельных приборов, а не установки в целом. Такой подход к автоматизации позволяет избежать выхода из строя всей установки из-за неисправности отвечающего за нее компьютера.

Таким образом, предложенная схема является простой и удобной в использовании: для взаимодействия с любыми установками используется унифицированная среда; кроме того, работа может осуществляться с любого устройства, имеющего доступ к интернету.

Данная система существует в тестовом режиме и в ближайшем будущем может быть внедрена на любую установку.

Исследование полиморфного фазового перехода в сложном молекулярном кристалле флуконазола при высоком давлении

*Е.А. Горковенко^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, Д.П. Козленко¹, Я.В. Вонсицки³,
В. Наврочик³, К. Лате⁴, Б.Н. Савенко¹*

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Московский государственный университет, Москва, Россия

³Университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша

⁴Helmholtz Centre Potsdam, Telegrafenberg, Потсдам, Германия

Одной из важнейших задач физики конденсированного состояния является изучение влияния высокого давления на структуру, динамику и свойства фармакологических компонентов. Объектом для изучения полиморфных превращений в данной работе был выбран распространенный синтетический препарат класса триазольных соединений флуконазол $C_{13}H_{12}F_2N_6O$. Используется данный лекарственный препарат для лечения и профилактики кандидоза и некоторых других микозов. Исследование структурных изменений флуконазола при высоких давлениях очень актуально, т. к. при таблетировании подобных лекарственных средств прикладывается очень высокое давление, что может отрицательно влиять на качество финального продукта.

Эксперименты по рентгеновской дифракции в диапазоне давлений до 2,5 ГПа проводились с использованием гидравлического пресса высокого давления MAX80, установленного на канале F2.1 источника DORIS-III (HASYLAB, DESY, г. Гамбург, Германия). Сочетание светосилы этого метода с малым шагом изменения давления позволило достоверно установить существование полиморфного фазового перехода в этом молекулярном кристалле. Уточнение структурных параметров произведено с помощью программ FullProf.

Для экспериментов с помощью метода комбинационного рассеяния света в диапазоне давлений до 4,4 ГПа в настоящей работе использовался спектрометр LabRam с гелий-неоновым лазером.

Рентгеновская дифракция и Рамановская спектроскопия позволили достоверно обнаружить полиморфный фазовый переход из формы-I в форму-II при давлении ~ 1,6 ГПа, структура которой описывается триклинной симметрией. В ходе работы предложена структурная модель для описания формы-II, рассчитаны барические коэффициенты параметров и объема элементарной ячейки для полиморфных форм I и II флуконазола.

Работа поддержана грантом РФФИ №14 - 02 – 00353.

Анализ структурных и фазовых переходов в фосфолипидных мембранах в присутствии сульфоксидов по данным малоуглового нейтронного рассеяния

Ю.Е. Горшкова

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Одной из важнейших функций биологических мембран является ее способность отделять клетку от окружающей среды. Нарушение целостности мембраны влечет за собой смерть клетки. Однако локальные и кратковременные изменения мембранной целостности приводят к созданию новой структуры путем слияния или деления клеток [1].

Слияние лежит в основе таких важнейших физиологических процессов, как экзоцитоз, секреция, образование вторичных лизосом [2]. Кроме того, направленное слияние клеток *in vitro* под действием различных фьюжн агентов широко используется для решения ряда задач в биомедицине и биотехнологии.

Одним из фьюжен агентов является Диметилсульфоксид (ДМСО). В присутствии ДМСО происходит образование пор в мембранах, в результате чего увеличивается их проницаемость и уменьшение жесткости мембран, что в свою очередь инициирует процесс слияния. ДМСО является токсичным для живых клеток. Диэтилсульфоксид (ДЭСО) менее токсичен, чем ДМСО и глицерол, например, для *E. coli*. Механизм взаимодействия ДЭСО и ДМСО с биологическими мембранами, по всей видимости, одинаков.

В текущей работе проведен анализ влияния концентрации ДМСО и ДЭСО на структурные и фазовые переходы в фосфолипидных мембранах по данным МУРН. Показано, что слияние происходит при более низкой молярной концентрации ДЭСО, чем ДМСО.

ДЭСО, как и ДМСО увеличивает температуру главного фазового перехода (T_f). Однако в присутствии ДМСО фазовый переход происходит раньше по температуре ($T_f = 35.2^\circ\text{C}$ и 33.6°C) и быстрее (в более узком диапазоне температур), чем в присутствии ДЭСО при одинаковой молярной концентрации сульфоксидов.

Исследования проводились в ЛНФ ОИЯИ на спектрометре ЮМО (ИБР-2, Дубна).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-02-01460.

1. J. A. Lucy, Nature 227, 814 (1970).
2. Q. F. Ahkong, D. Fisher, et al., Nature 253, 194 (1975).

Параметризация структуры цементных композиций по данным малоуглового рассеяния нейтронов

А.М. Гурьянов¹, В.Т. Лебедев², В.М. Лебедев²

¹ Самарский государственный архитектурно-строительный университет, Самара, Россия

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Свойства цементного камня (прочность, долговечность и другие) зависят от распределения по размерам и форме наночастиц гидросиликата кальция (С-S-H), образующихся при гидратации цемента и создающих сложный гелеобразный каркас, соотношения свободной и связанной воды, заполняющей пространство между твердыми частицами гидросиликатов, наличия пор и распределения их по размерам и форме, то есть определяются структурными параметрами материала на микро- и наноуровне.

В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов определялись структурные параметры гидратированных цементных композиций, и прослеживалась динамика изменений этих параметров в зависимости от времени (до шести месяцев от начала гидратации). Измерения проводились с помощью дифрактометра "Мембрана-2", установленного на реакторе ВВР-М Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова (г. Гатчина).

Из полученных экспериментальных данных для сечений малоуглового рассеяния нейтронов восстанавливались распределения рассеивающих объектов по размерам. Проведены модельные построения фрактала, опирающиеся на данные малоуглового рассеяния нейтронов. Рассчитана величина фрактальной размерности.

Интенсивности полученных экспериментальных спектров малоуглового рассеяния имеют степенную зависимость от передаваемого нейтронного импульса $I(q) \propto q^{-n}$, что является характерным для фрактальных структур. Для области значений передаваемых нейтронных импульсов q , соответствующих большим размерам рассеивающих объектов, $n = D$, а для области значений q , соответствующих малым размерам рассеивающих объектов, $n = 6 - D_s$, где D и D_s – размерности объемного и поверхностного фракталов соответственно. Для исследованных образцов цементных композиций фрактальные размерности D и D_s принимали значения в диапазоне 2,3÷2,8. Проведено сравнение полученных экспериментально и теоретически значений структурных параметров.

Проведенные исследования позволяют говорить о том, что рассмотренные цементные композиции образованы фрактальными кластерами.

Изучение внутренней структуры годовых слоев в озерных отложениях с помощью синхротронного излучения с использованием фокусирующей рентгеновской оптики

Ф.А. Дарьин¹, Я.В. Ракшун¹, Д.С. Сороколетов¹, А.В. Дарьин²

¹Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия

²Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия

Ежегодно ламинированные осадочные отложения являются одним из наиболее важных палеоклиматических архивов с годовым временным разрешением. Озерные отложения содержат подробную геохимическую информацию об изменениях климата за тысячи лет.

Исследуемый образец представляет собой донный осадок оз. Донгуз-Орун (Кавказ), подготовленный вымораживанием в вакууме для сохранения оригинальной структуры и пропитанный эпоксидной смолой.

Сканирование с шагом 30 мкм проводили на станции элементного анализа при энергии возбуждения 19 кэВ, с использованием устройства и процедуры, описанной в [1,2]. Диаметр сфокусированного пятна синхротронного излучения составляет 15 мкм.

Время измерения в одной точке составляет 20 секунд, что позволяет определить содержание более чем 15 элементов, в том числе породообразующие элементы: К, Са, Ti, Mn, Fe и микроэлементы: V, Cr, Ni, Cu, Zn, Ga, As, Se, Br, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo.

Анализ элементов, измеренных в области сканирования образца, выявляет геохимические индикаторы, различные для весенне-летних и зимних условий накопления осадков, что позволяет маркировать ежегодные слои. Максимальное отношение Rb/Sr соответствуют быстрому накоплению осадка в течение весенних и летних паводков.

Работа выполнена на оборудовании центра коллективного пользования «Сибирский Центр Синхротронного и Терагерцового Излучения» и поддержана грантами РФФИ № 13-05-00871, 14-02-00631.

1. Дарьин А.В., Калугин И.А., Ракшун Я.В. Сканирующий рентгеноспектральный микроанализ образцов донных осадков с использованием синхротронного излучения из накопителя ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН. Известия РАН. Серия физическая. - 2013. - Т. 77. - № 2. - С. 204-206

2. Дарьин А.В., Калугин И.А., и др. Сканирующий рентгенофлуоресцентный микроанализ годовых слоев в образцах донных осадков оз. Шира. Известия РАН. Серия физическая. - 2013. - Т. 77. - № 2. - С. 207-209

**Рентгенофлуоресцентный микроанализ геологических образцов
на пучках синхротронного излучения
(российский и международный опыт)**

А.В. Дарьин¹, Я.В. Ракшун²

¹ *Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия*

Рентгеновская оптика, позволяющая получать пучки размерами менее 1 мкм в широком диапазоне энергий возбуждения, и достаточная доступность синхротронного излучения, привели к созданию нового направления в рентгеноспектральном анализе – микроанализу (micro-XRF). В отличие от микрозондов с электронным или протонным пучком, использование синхротронного излучения существенно облегчает процесс подготовки образца и проведения аналитических измерений, значительно (на два порядка) снизив пределы обнаружения.

На ВЭПП-3 (ИЯФ СО РАН) первые эксперименты по сканирующему микроанализу геологических образцов были начаты в конце 80-х годов прошлого века [1, 2]. За прошедшие годы был создан ряд модификаций экспериментальных станций сканирующего микроанализа, разработаны и аттестованы методики измерений, проведены многочисленные исследования геологических образцов: полиметаллических и благороднометалльных руд; алмазоносных эклогитов; фосфоритов и железомарганцевых конкреций; кернов морских и озерных донных осадков. Параметры действующей в настоящее время в ИЯФ станции [3] - диапазон энергий возбуждения 10 – 30 кэВ, минимальный размер пятна – 10 мкм, точность позиционирования – 1 мкм, предел обнаружения до 0,1 ppm - близки к аналогичным установкам в европейских и китайских центрах синхротронного излучения (BESSY-II, DESY, ANKA, SSRF).

В ИЯФ СО РАН, Новосибирск создана экспериментальная установка для исследования микроэлементного состава геологических образцов с субмикронным пространственным разрешением. За последние годы с ее помощью решен ряд прикладных задач в петрологических и литолого-геохимических исследованиях. Полученные результаты были подтверждены исследованиями в зарубежных центрах.

Поддержка грантами РФФИ №13-05-00871, 14-02-00631 и РФФИ №14-17-00200.

1. Baryshev V. B.; Gavrilov N. G.; Daryin A. V.; Zolotarev K. V.; Kulipanov G. N.; Mezentsev N. A.; Terekhov Ya. V. // Review of Scientific Instruments. 1989. V. 60. N 7. Pt II. P. 2456.
2. Daryin A. V.; Baryshev V. B.; Zolotarev K. V. // Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. A 308(1991), 1.1-2, P. 318
3. Дарьин А.В., Калугин И.А., Ракшун Я.В. // Известия РАН. Серия физическая. - 2013. - Т. 77. - № 2. - С. 204-206.

Проявление интерференции и дифракции ультрамягкого синхротронного излучения в области L-краев поглощения кремния в наноструктурах

Э.П. Домашевская¹, В.А. Терехов¹, С.Ю. Турищев¹, М.А. Андреева²

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Московский государственный университет, Москва, Россия

Проводя исследования наноструктур с 2002 года на синхротронах BESSY II (Германия) и SRC (США) путем регистрации спектров квантового выхода фотоэлектронов вблизи главного края поглощения L- спектров кремния (XANES Si L_{2,3}), мы обнаружили ряд необычных рентгенооптических явлений, связанных с особенностями атомного строения наноструктур, обусловленными их неоднородностью на малых масштабах, наличием множественных гетерограниц, развитых поверхностей и др., в результате чего пришли к необходимости проводить измерения спектров XANES под различными углами скольжения синхротронного излучения (СИ).

В частности, в структурах кремний-на-изоляторе (КНИ) с толщиной слоя кремния ~ 100 нм, мы обнаружили при малых углах скольжения СИ ($\theta < 21^\circ$) частотно модулированное распределение интенсивности в области энергий СИ, предшествующей главному краю поглощения XANES Si L_{2,3} ($h\nu < 100$ эВ). При этом, с изменением угла скольжения на каждые 2° , происходит инверсия интенсивности интерференционных волн, при которой максимум спектра квантового выхода становится минимумом и наоборот.

Таким образом, структура КНИ образует своеобразный плоский волновод в нанометровой области длин волн СИ, ограниченной длиной волны, соответствующей краю поглощения кремния. Оценки толщины слоя кремния в структурах КНИ, в соответствии с формулой, связывающей параметры интерференционных волн с толщиной слоя дали величины, близкие к технологическим. Расчеты показали, что периодические изменения выхода электронов при изменении энергии фотонов и угла скольжения СИ обусловлены соответствующими изменениями напряженности электромагнитного поля на поверхности структуры КНИ.

Исследуя угловую зависимость спектров XANES Si L_{2,3} в многослойных нанопериодических структурах $(Al_2O_3/SiO_x)_n/Si$, мы обнаружили влияние брэгговской дифракции, в виде глубоких провалов интенсивности, при энергиях, соответствующих структурным параметрам МНС.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2014-2016 годы, проект № 1606, 757 и задание № 3.1868.2014/К.

**Структурные особенности кристаллов KDP
с инкорпорированными наночастицами диоксида титана
со структурами анатаза и η -TiO₂**

*Е.Н. Доморошина¹, О.И. Тимаева¹, Г.М. Кузьмичева¹, В.Б. Рыбаков²,
А.В. Косинова³*

¹ *Московский государственный университет тонких химических технологий,
Москва, Россия*

² *Московский государственный университет, Москва, Россия*

³ *Институт монокристаллов НАНУ, Харьков, Украина*

В последнее время обсуждаются перспективы создания новых нелинейно-оптических сред на основе кристаллов KDP (KH₂PO₄), обладающие уникальной совокупностью физических свойств, с наночастицами TiO₂, что должно способствовать улучшению важных функциональных характеристик материалов [1]. В работе [2] показано, что наночастицы TiO₂ оседают на поверхности блоков кристалла KDP, увеличивая величину кубической нелинейной восприимчивости и меняя знак коэффициента отражения в диапазоне интенсивности до 20 МВт/см². Авторы [3] выявили корреляцию величины диэлектрической проницаемости с дефектностью позиции водорода в структуре KDP:TiO₂.

Цель работы – установление влияния наночастиц TiO₂ разной природы на специфику структуры композитов KDP:TiO₂.

Образцы с TiO₂, синтезированные сульфатным методом, отличались типами структур (анатаз и η -TiO₂), размерами кристаллитов (50(4)Å и 38(2)Å) и содержанием серы (2.17÷3.73 вес%S и 4.37÷7.58 вес%S). Кристаллы KDP и композиты KDP:TiO₂ (композиты I и II соответственно с анатазом и η -TiO₂) выращены методом снижения температуры раствора на точечной заправке [1]. Анализ результатов рентгеноструктурного изучения микрочастей из пирамидального (ПИР) и призматического (ПР) секторов роста выявил существенные структурные изменения композита II (ПР): замещение тетраэдров PO₄ на SO₄, дефектность в позиции K¹⁺ и нахождение вблизи нее ионов титана: (K_{0.950(1)}□_{0.050})Ti_{0.052(2)}i(H¹⁺_{2-x}□_x)[(PO₄)³⁻_y(SO₄²⁻)_{1-y}]. Таким образом, инкорпорирование нано-TiO₂ в кристаллическую матрицу KDP оказывает влияние как на микроструктуру [2], так и на кристаллическую структуру.

1. V. Ya. Gayvoronsky, M. A. Kopylovsky, et. al., Phys. Lett. 10. (2013).

2. V. G. Grachev, I. A. Vtable, et.al., Appl. Phys. 112. (2012).

3. Тимаева О.И., Гребенев В.В., Кузьмичева Г.М., Рыбаков В.Б. Тез. докладов V молодежной научно-технической конф. «Наукоемкие химические технологии – 2013» (1-2 ноября 2013 г., Москва): М.: Издательство МИТХТ, 2013. С.120.

Наноструктура углеродных матриц, содержащих редкоземельные элементы: нейтронные исследования

*И.М. Дубовский¹, А.С. Соболева¹, А.А. Авсиевич¹,
В.М. Лебедев², В.Т. Лебедев², В.И. Тихонов², А.Е. Совестьнов²*

¹ Санкт-Петербургский технологический институт, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Проблема обращения с долгоживущими радиоактивными отходами становится с течением времени всё актуальнее, и от её решения зависит будущее ядерной энергетики. Сейчас основным способом решения этой проблемы является захоронение отходов в виде различных твёрдых матриц, изолирующих их от окружающей среды, т.е. очевидна необходимость создания принципиально новых, химически, термически и радиационно стойких матриц, не содержащих в своём составе сильно активируемых нейтронами элементов и прочно удерживающих отходы при длительном хранении. Этим требованиям удовлетворяют матрицы из углеродных материалов – дифталоцианинов. Углерод химически стоек, выдерживает большие тепловые нагрузки, и оба стабильных его изотопа (^{12}C и ^{13}C) имеют низкое значение захвата нейтронов. Монофталоцианины – планарные молекулы с формулой $[\text{C}_{64}\text{H}_{32}\text{N}_{16}\text{Me}]$, дифталоцианины (ДФЦ) состоят из двух планарных молекул с атомом металла между ними. Пиролиз в атмосфере аргона при температурах выше 800°C приводит к образованию композита – высокопористой структуры MeC_x ($x=30-35$) с атомами металла в полостях углеродной матрицы. Введение радионуклидов в пустоты подобной матрицы предоставляет уникальные возможности для их хранения и трансмутации, учитывая низкую стоимость исходного сырья и оборудования для синтеза, большой выход готового продукта, высокую концентрацию внедренного металла. Чтобы оптимизировать функциональные свойства матриц пиролизированных ДФЦ, необходим анализ их структуры в зависимости от температуры пиролиза, типа и химического состояния внедряемых элементов.

В работе методом малоуглового рассеяния нейтронов выполнены исследования пиролизатов ДФЦ металлов (Y, La, Ce, Sm, U) с целью установить закономерности формирования их наноструктуры при изменении температуры пиролиза в широких пределах ($800-1750^\circ\text{C}$). Показано, что строение пористой матрицы на масштабах $\sim 10^0-10^2$ нм характеризуется уровнем малых пор (радиусы 3 – 10 нм) и следующим уровнем структуры, связанным с формированием из них агрегатов (размеры больше 100 нм). Количество и размер рассеивающих объектов резко увеличиваются при температурах отжига выше 1000°C .

Особенности олигомеризации пептида из гликопротеина вируса Эбола по данным малоуглового рассеяния нейтронов

В.В. Егоров^{1,2}, А.Н. Горшков², А.И. Куклин^{3,4}, А.В. Васин^{2,5},
В.В. Исаев-Иванов¹, О.И. Киселев², Д.В. Лебедев¹

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

² *«НИИ гриппа» Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *Московский физико-технический институт (государственный университет), Научно-образовательный центр «Бионанофизика», Долгопрудный, Россия*

⁵ *Институт прикладной математики и механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, Санкт-Петербург, Россия*

Белок GP вируса Эбола — основной структурный белок, играющий ключевую роль в проникновении вируса в клетку. Изучение влияния аминокислотных замен на этот процесс и изучение структуры GP, выделенных из разных штаммов, позволило определить ряд областей, критичных для функционирования белка. Одной из таких областей является участок 551-560, содержащий консервативный остаток цистеина (556), участвующий в формировании пространственной структуры. Данный участок был выбран нами в качестве мишени для поиска низкомолекулярных соединений, способных осуществлять специфическое взаимодействие с белком GP и модулировать окисление консервативного цистеина. Изучение пептидной модели биохимическими методами позволило сделать предположение о роли остатка глутамина в 560 позиции в процессе формирования внутримолекулярной дисульфидной связи. Кроме того, было обнаружено, что участок 551-560 может играть роль в функциональной олигомеризации GP.

Для проверки данной гипотезы мы изучили способность к олигомеризации модельного пептида, соответствующего участку 551-560 белка GP вируса Эбола штамма Судан (GenBank YP_138523.1) и модельного пептида с аминокислотной заменой, соответствующей замене Q560G с помощью просвечивающей электронной микроскопии и малоуглового рассеяния нейтронов. Было показано, что модельный пептид, соответствующий GP склонен к образованию высокомолекулярных нековалентно связанных фибриллоподобных комплексов, в то время как несущий замену пептид значительно менее склонен к полимеризации и в основном образует компактные низкомолекулярные олигомеры.

Изученная модельная система может быть использована для скрининга влияния различных низкомолекулярных веществ на функциональные внутри- и межмолекулярные взаимодействия белка GP вируса Эбола, что, принимая во внимание опасность работы с живым вирусом, является важным шагом на пути поиска фармакологических инструментов для борьбы с данным заболеванием.

Моделирование конформационных особенностей фибриллогенного пептида

В.В. Кадочников^{1,3}, А.В. Швецов^{1,3}, В.В. Егоров^{1,2}, Д.В. Лебедев¹

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

² «НИИ гриппа» Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия

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

Образование амилоидных агрегатов сопутствует целой группе болезней, называемых амилоидозами, которые характеризуются конформационными изменениями белков [1]. Примерами могут служить болезнь Альцгеймера, Паркинсона, прионные заболевания. Понимание механизмов образования фибрилл и префибриллярных олигомеров играет важную роль для нахождения ингибиторов этого процесса.

В качестве модельного объекта был выбран участок альфа-лактальбумина человека 35 GYDTQAIVENNESTEYGG 51 (WT), для которого ранее была показана склонность к образованию амилоидоподобных бета-структур и агрегации [2].

Было проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование мономеров WT в периодическом водном боксе. По полученным данным можно сделать вывод о межмолекулярном характере бета-структур.

Исходя из гипотезы о влиянии симметрии на фибриллогенез, было выдвинуто предположение, что аналог С-концевого участка TDYG (R) может влиять на конформационную динамику WT. Для проверки этой гипотезы рассматривалась модель, которая включала WT и тетрапептиды R. Были получены траектории МД, которые использовались для анализа. Из полученных данных было сделано предположение, что тетрапептиды стабилизируют бета-структуры, за счет которых происходит олигомеризация WT.

С помощью атомно-силовой микроскопии, флуориметрии и малоуглового рассеяния нейтронов было показано, что присутствие пептида R в растворе пептида WT существенно увеличивает скорость его фибриллогенеза, что согласуется с результатами моделирования.

1. G. Merlini, V. Belotti, Molecular mechanism of amyloidosis, N. Engl. J. Med. 349 (2003) 583-596

2. V.Egorov, Y.Garmaj, K. Solovyov, N. Grudinina, T. Aleinikova, A. Sirotkin, O. Kiselev, M. Shawlovsky, Amyloidogenic peptide homologous to beta-domain region of alpha-lactalbumin, Dokl Biochemistry Biophysics 414 (2007) 152-154

Катионное упорядочение в нанопорошках тройных оксидов $\text{Ln}_2\text{O}_3\text{-MeO}_2$ ($\text{Ln}=\text{Dy},\text{Gd};\text{Me}=\text{Zr},\text{Hf}$): байесов анализ данных XAFS-спектроскопии

*О.В. Кашурникова¹, А.П. Менушенков¹, В.В. Попов¹, В.Ф. Петрунин¹,
А.А. Ярославцев¹, Я.В. Зубавичус², А.А. Велигжанин², Р.В. Черников³*

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

²РНИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³HASYLAB, DESY, Гамбург, Германия

Сложные оксиды $\text{Re}_2\text{O}_3\text{-MeO}_2$ ($\text{Re}=\text{Dy},\text{Gd}$, $\text{Me}=\text{Hf},\text{Zr}$) применяются в качестве эффективных нейтронопоглощающих материалов и теплозащитных систем, электролитов [1]. В данной работе исследованы нанопорошки $\text{Dy}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, $\text{Gd}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, $\text{Gd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ с размером частиц от 1 до 50 нм, которые были синтезированы из аморфных прекурсоров при температурах 600-1500°C.

Для исследования структуры полученных образцов применялись методы обычной порошковой дифракции, XAFS (в синхротронных центрах MAXlab, г. Лунд, Швеция, и HASYLAB, DESY, Гамбург, Германия), а также обычной и аномальной дифракции с применением синхротронного излучения (КЦСИ, РНИЦ «Курчатовский институт»). Полученные результаты, которые свидетельствовали о дефектности структуры флюорита в низкотемпературных образцах и возможном упорядочении структуры в высокотемпературных, требовали проверки статистической обусловленности извлекаемых параметров и качества модели. Для такой проверки был использован Байесов метод обработки экспериментальных данных [2], позволяющий определить обусловленность задачи относительно того или иного параметра и провести точный анализ погрешностей. Были выделены плохо обусловленные параметры, уточнены данные о процессах катионного упорядочения при фазовом переходе и релаксации межатомных расстояний, проведено сравнение моделей. Определено влияние наноразмерности кристаллитов на структуру [3]. Показано, что данный метод обработки данных является мощным инструментом извлечения надежной информации об изучаемом соединении из разных экспериментальных методик.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 11-02-01174а и программы ФЦП «Кадры» ГК 16.740.11.0139.

1. Risovany V.D. et al. J. Nucl. Mater. 2006. V. 355. № 1. P. 163.
2. Krappe H.J., Rossner H.H. Phys. Rev. B. 2002. V.66. P.184303.
3. Petrunin V.F. NanoStruct. Mater. 1999. V. 12. № 8. P. 1153.

Распределение химических элементов вдоль керна отложений грязевого грифона (Камчатка, Узон), полученное методом сканирования РФА-СИ

И.С. Кириченко¹, С.М. Жмодик¹, Е.В. Лазарева¹

Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия

Донные отложения озер при непрерывном осадконакоплении отражают историю формирования осадков, а также физико-химические условия его образования. В настоящей работе с помощью неразрушающего, высокоразрешающего сканирования РФА-СИ, зарекомендовавшего себя, как эффективный метод определения химического состава донных отложений озер [1-3], в совокупности с ААА были исследованы осадки потухшего глиняного котла (кальдера Узон, Камчатка).

Целью исследования является выявление и анализ распределения элементов в кернах донных отложений глиняного котла кальдеры Узон с применением комплекса методов анализа элементного состава для последующего восстановления физико-химических условий формирования отложений термального водоёма.

Кальдера Узон представляет западную часть Узон-Гейзерной депрессии, расположенной в средней части Восточно-Камчатского вулканического пояса [4]. В полевой период была отобран керн отложений грифона глубиной 130 см с сохранением структуры осадка. РФА анализ с использованием синхротронного излучения был проведен на станции коллективного пользования СЦСТИ (Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения), накопитель ВЭПП 3 в ИЯФ СО РАН им. Будкера. Подготовленные образцы облучались пучком коллимированного, поляризованного, монохроматического излучения с апертурой 1 мм. Использовались два режима анализа: с энергией источника 27 кэВ и 40 кэВ: первый – для определения элементов от К до Мо; второй – более тяжелых элементов, а также для контроля полученных в предыдущих сериях анализа данных.

Применение метода сканирования РФА–СИ позволило получить новые данные о распределении химических элементов с высоким разрешением (1 мм) в осадках глиняного котла, а также выявить сложную структуру распределения химических элементов по разрезу.

1. V.A Bobrov V.A, I.A Kalugin, et al., J. Nucl. Inst. and Meth. 569, 405 (1998).
2. E.L Goldberg E.L, M.A Phedorin M.A, et al. J. Nucl. Inst. and Meth. 384, 448(2000).
3. M.A Phedorin, V.A Bobrov, et al, J. Nucl. Inst. and Meth. 560, 405(1998).
4. А.Ю Бычков. М.: ГЕОС, 2009.

Исследование механохимического легирования флюоритов ионами Er^{3+} методами рентгеноструктурного анализа

А.Г. Киямов¹, И.А. Ирисова¹, Д.А. Таюрский¹

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

В последнее время исследования по механоактивированным процессам в твердых телах стремительно развиваются. В работе [1] с использованием спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) показано, что во время механохимического легирования порошков соединений CaF_2 , SrF_2 ионами Er^{3+} образуются примесные центры одиночных ионов эрбия кубической симметрии. Исследования зависимостей интенсивности спектров ЭПР от размера частиц показывают, что процесс механохимического легирования ионами Er^{3+} реализуется различным образом для матриц CaF_2 , SrF_2 . Однако, исследования выше посвящены только одному методу, а именно методу ЭПР. В то же время, существует другой, весьма эффективный метод для изучения механохимического легирования фторидов редкоземельными (РЗ) ионами, а именно метод рентгеноструктурного анализа. Актуальность и применимость этого метода заключается в том, что исследуя взаимные отношения интегральных интенсивностей пиков дифрактограммы можно изучать кристаллические структуры на предмет замещения одних атомов другими. В данной работе исследовались порошки флюорита, механохимически легированные ионами Er^{3+} , которые были получены посредством перемалывания смесей кристаллических солей высокой степени чистоты CaF_2 (SrF_2) и ErF_3 (1 вес.%) в агатовой ступке. Для оценки легирования CaF_2 и SrF_2 ионами Er^{3+} исследовались отношения интегральных интенсивностей дифракционных пиков – I_{311}/I_{220} и I_{331}/I_{220} в случае CaF_2 , и I_{200}/I_{111} и I_{220}/I_{111} в случае SrF_2 . Для корректной интерпретации данных с помощью программы Powder cell были рассчитаны теоретические дифрактограммы изучаемых фторидов, легированных ионами Er^{3+} . Из рассчитанных дифрактограмм были получены зависимости отношений интенсивностей от степени легирования ионами Er^{3+} . Сравнивая отношения интенсивностей, полученных экспериментально, с расчетными зависимостями можно однозначно утверждать, что в процессе механохимического легирования происходит замещение катионных позиций атомами Er^{3+} . Результаты, полученные методом рентгеновской дифрактометрии находятся в хорошем согласии с результатами, полученными методом ЭПР.

1. Irisova I EPR studies of the mechanochemically Er^{3+} -activated fluorite nanoparticles, Irisova I. A., Rodionov A. A., Tayurskii D. A., Yusupov R. V., J. Phys.: Conf. Ser. 324, 012026 (2011).

**Закономерности изменения мезоструктуры оксида состава
8мол.%Y₂O₃-92мол.%ZrO₂ при термообработке ксерогеля**

*Г.П. Копица¹, Н.П. Симоненко², Е.П. Симоненко², В.Г. Севастьянов²
Н.Т. Кузнецов², L. Almásy³*

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

²*Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия*

³*Institute for Solid State Physics and Optics, WRCF, Budapest, Hungary*

Сегодня на фоне активно развивающейся промышленности растёт потребность в современных материалах, способных эксплуатироваться в экстремальных условиях – при высоких температурах и механических нагрузках, в том числе в агрессивных средах. Оксид циркония, стабилизированный иттрием, благодаря фазовой стабильности является одним из наиболее востребованных и перспективных веществ, удовлетворяющих указанным требованиям. Одной из важнейших задач при этом является разработка универсальных способов синтеза тугоплавких оксидов металлов сложного состава в виде нанокристаллических порошков с заданной структурой. Золь-гель технология с использованием в качестве реагентов ацетилацетонатов металлов позволяет эффективно решать данную задачу и синтезировать высокодисперсные оксиды заданного состава с контролируемой микро- и мезоструктурой [1-4].

Целью настоящей работы являлось изучение закономерностей изменения параметров мезоструктуры оксида состава 8мол.%Y₂O₃-92мол.%ZrO₂ в процессе термической обработки ксерогеля. Образцы оксида циркония, стабилизированного иттрием, были получены золь-гель методом при термообработке соответствующего ксерогеля на воздухе в течение шести часов при различных температурах в интервале от 400 до 800°C. В качестве основного метода анализа мезоструктуры оксида состава 8мол.%Y₂O₃-92мол.%ZrO₂ использовали метод МУРН.

Из экспериментальных сечений рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ нейтронов получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы кристаллитов R_c и удельные площади поверхности $S_{уд}$, а также прослежена их эволюция на разных стадиях термической обработки. Проведено сравнение данных МУРН с результатами, полученными методами РФА, СЭМ и низкотемпературной адсорбции азота.

1. Н.Т. Кузнецов, В.Г. Севастьянов, Е.П. Симоненко, Н.П. Симоненко, Н.А. Игнатов. Патент РФ №2407705, 2010.

2. V.G. Sevastyanov, E.P. Simonenko, N.P. Simonenko, N.T. Kuznetsov. *Russ. J. Inorg. Chem*, 2012, 57, 307-312.

3. E.P. Simonenko, N.P. Simonenko, V.G. Sevastyanov, N.T. Kuznetsov. *Russ. J. Inorg. Chem*, 2012, 57, 1521-1528.

4. E.P. Simonenko, N.P. Simonenko, V.G. Sevastyanov, D.V. Grashchenkov, N.T. Kuznetsov, E.N. Kablov. *Composites and Nanostructures*, 2011, 4, 52-64.

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

Г.П. Копица¹, Т.В. Хамова², О.А. Шилова², В. Angelov³

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

² *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

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

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

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

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

Работа выполнена при поддержке программ Президиума РАН № 24.

Влияние импульсного ионного облучения на структуру и фазовый состав композита SnO_x/МУНТ, сформированного методом CVD

П.М. Корусенко¹, С.Н. Несов¹, В.В. Болотов¹

Омский научный центр СО РАН, Омск, Россия

В настоящей работе исследовано изменение структурно-морфологических особенностей и фазового состава композита SnO_x/МУНТ, сформированного методом CVD на массивах азотдопированных МУНТ, при воздействии мощного ионного облучения наносекундной длительности. Анализ исходного и модифицированного композита проводился методами XANES, XPS, AES, а также методами сканирующей и просвечивающей микроскопии (SEM и TEM) Данный композитный материал может успешно применяться в качестве базы для литий-ионных батарей и газовых сенсоров [1].

Облучение композита SnO_x/МУНТ проводилось импульсным ионным пучком (H⁺–15%, C⁺–85%) в ТПУ (г. Томск) при энергии 300 кэВ, длительности импульса 80 нс и плотности энергии 0,5-0,6 Дж/см².

Исследование исходного композита SnO_x/МУНТ методом TEM показало, что формируется композитная структура типа “бусы”, в которой глобулы оксида олова закрепляются на отдельных нанотрубках. При этом имеется достаточно много открытых участков МУНТ, не покрытых оксидом олова. Исследование структуры и фазового состава композита методами XPS, AES и XANES [2] показало, что глобулы металлоксидного компонента представлены преимущественно кристаллическим диоксидом олова. Однако, по данным TEM, в составе глобул оксида наблюдается присутствие некоторой доли аморфного оксида олова. Облучение композита мощным ионным пучком приводит к существенному изменению структурно-морфологического строения и фазового состава поверхности. По данным TEM происходит значительное изменение структурно-фазового состояния металлоксидного компонента: наблюдается диспергирование частиц оксида олова и его перераспределение на поверхности МУНТ. Кроме того, металлоксидный компонент облученного образца обладает гетерогенной структурой с четкими межфазными границами, в которой по данным XPS, EDX, TEM, а также микродифракции, частицы восстановленного металлического олова закрепляются непосредственно на поверхности трубок. Поверхность данных частиц покрыта аморфным оксидом олова, причем слой оксида покрывает МУНТ также и в местах, где отсутствуют частицы металлического Sn.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-02-31649-мол_a.

1. M. Alaf, H. Akbulut, Journal of Power Sources 247 (2014)
2. В.В.Болотов, С.Н.Несов, П.М.Корусенко, С.Н.Поворознюк, ФТТ 56, 9 (2014)

Синхротронные исследования образования нанокристаллов кремния в многослойных нанопериодических структурах SiO_x/диэлектрик

*Д.А. Коюда¹, С.Ю. Турищев¹, В.А. Терехов¹, Д.Е. Спириин¹, Е.В. Паринова¹,
Д.Н. Нестеров¹, Д.А. Грачев², И.А. Карабанова², А.В. Ершов²,
А.И. Машин², Э.П. Домашевская¹*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия

В работе представлены результаты диагностики синхротронным методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) трёх серий многослойных нанопериодических структур (МНС): SiO_x/SiO₂, SiO_x/Al₂O₃, SiO_x/ZrO₂. При высокотемпературном отжиге высока вероятность образования массивов нанокристаллов и/или кластеров кремния как следствие термического распада слоя SiO_x. Формирование данных структур перспективно для создания оптоэлектронных устройств в рамках кремниевых технологий.

В данной работе толщина каждого слоя МНС изменялась в пределах от 2 до 8 нм. С целью получения ограниченных по размеру наночастиц кремния все структуры были отожжены при температурах до 1100 °С. Экспериментальные спектры XANES были зарегистрированы в центре синхротронного излучения SRC (США).

По данным Si L_{2,3} спектров XANES (глубина анализа ~5 нм) при отжиге в 1100°С для всех структур наблюдается образование нанокластеров кремния. Сопоставление Si К спектров XANES исследуемых МНС при глубине информативного слоя ~65 нм со спектрами эталонных образцов позволили заключить, что во всех структурах при температуре отжига в 1100°С наблюдаются спектральные особенности при энергиях фотонов ~1852 эВ. Данный результат свидетельствует о формировании нанокристаллов кремния в более глубоких слоях МНС. Температурная обработка МНС приводит и к проявлению интенсивной размерно-зависимой фотолюминесценции в области энергии излучения ~1.4 – 1.52 эВ. Сопоставление Si К спектров XANES всех отожжённых структур показало, что наибольшая эффективность формирования nc-Si наблюдалась в структурах SiO_x/Al₂O₃. Это может объясняться возможным химическим взаимодействием между нанослоями двух других типов МНС при температурном отжиге, что приводит к уменьшению средних размеров nc-Si.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2014-2016 годы (проект № 1606, задание № 3.1868.2014/К).

Рентгеноспектральная диагностика атомной структуры геологических материалов

А.Н. Кравцова¹, И.С. Родина¹, А.В. Солдатов¹, А.М. Walker², А.Ж. Berry³

¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

² University of Leeds, Leeds, United Kingdom

³ Australian National University, Canberra, Australia

Рентгеновская спектроскопия поглощения на источниках синхротронного излучения является эффективным методом исследования локальной атомной структуры геологических материалов. Рентгеновская спектроскопия поглощения в ближней к краю области (XANES) позволяет получать информацию о полной трехмерной структуре (межатомные расстояния, углы связей) вокруг поглощающего типа атомов. Недавно XANES спектроскопия была успешно применена при исследовании атомной структуры титансодержащих геологических материалов, Ti-содержащего циркона[1] и Ti-содержащего форстерита[2].

Объектом настоящего исследования является титансодержащий хибонит. Хибонит ($\text{CaAl}_2\text{O}_{19}$) – минерал, найденный в богатых кальцием и алюминием включениях хондритовых метеоритов [3]. Он может включать в свою структуру значительное количество поливалентных элементов, в том числе и титан. Исследование хибонита дает потенциал определения условий, происходящих в ранней Солнечной системе. В представляемом исследовании структура вокруг атомов титана в хибоните изучается на основе XANES спектроскопии и компьютерного моделирования.

В работе выполнены расчеты спектров XANES за K-краем титана для нескольких структурных моделей Ti-содержащего хибонита. Рассмотрены модели как изолированных дефектов (Ti^{3+} и Ti^{4+}), так и кластеризованного титана. Спектры рассчитаны на основе метода полного многократного рассеяния в рамках маффин-тин приближения для расчета кристаллического потенциала с использованием программ FEFF9 и FDMNES, а также полнопотенциального метода конечных разностей с помощью программного кода FDMNES. Проведено сопоставление теоретических спектров с экспериментальными Ti K-XANES спектрами, зарегистрированными для природных и синтезированных образцов хибонита с различной концентрацией титана.

Работа выполняется при поддержке грантом РФФИ 14-05-00580.

1. N. D. Tailby, A. M. Walker, A. J. Berry, J. Hermann et al., *Geochimica et Cosmochimica Acta* 75, 905 (2011).
2. И. С. Родина, А. Н. Кравцова, А. В. Солдатов, А. Дж. Берри, *Оптика и спектроскопия* 111, 980 (2011).
3. P. M. Doyle, P. F. Schofield, A. J. Berry, A. M. Walker, K. S. Knight, *American Mineralogist* 99, 1369 (2014).

Восстановление субстрата цитохром с нитритредуктазой под действием ионизирующего излучения

В.А. Лазаренко^{1,2}, А.А. Трофимов¹, К.М. Поляков¹, А.Н. Попов³

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Институт молекулярной биологии РАН, Москва, Россия

³ Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

Современное состояние экспериментальных методов рентгеновской кристаллографии белков позволяет не только изучать ферментативные реакции традиционными методами, основанными на решении структур комплексов фермента с аналогами субстрата, имитирующими различные стадии ферментативной реакции, но и пытаться исследовать динамику ферментативных превращений прямо в белковом кристалле. Для использования такого подхода необходимо, во первых, уметь запускать ферментативную реакцию в кристалле фермента, во вторых, иметь кристаллы фермента чрезвычайно высокого качества. Для ферментов, катализирующих окислительно-восстановительные реакции с участием ионов металлов переменной валентности, запустить ферментативную реакцию в кристалле возможно используя восстановительные свойства рентгеновского излучения.

Рентгеновские фотоны могут взаимодействовать с атомами белка упруго, давая вклад в дифракционную картину, или неупруго - с Комптоновским или фотоэлектронным эффектами. Неупругое взаимодействие приводит к радиационному разрушению молекул белка в результате инъекции электронов и образования радикалов [1].

В данной работе был проведен анализ серий наборов полных дифракционных данных свободной формы белка TvNiR и его комплексов с нитритом и сульфитом.

В сериях структур TvNiR удается детектировать постепенное восстановление каталитических гемов под действием рентгеновского излучения. В случае свободной формы TvNiR признаками данного восстановления являются постепенное увеличение расстояния Fe-O и диссоциация молекул воды, связанных с каталитическими ионами железа, с ростом дозы поглощенного излучения. В серии структур сульфитного комплекса TvNiR восстановление гемов приводит к протонированию O1-атомов сульфит-ионов, связанных в форме SO_3^{2-} . Этот эффект проявляется в структурах в виде реорганизации связывания молекул воды в активном центре. В случае нитритного комплекса TvNiR рентгеновское излучение инициирует превращение нитрит-ионов в лиганды NO, наклоненные в сторону остатков His361 и Tyr303, что является началом каталитической реакции.

1. Garman EF. 2010. Acta Crystallogr D Biol Crystallogr. 66(Pt 4):339-51.

Углеродные структуры для биомедицины

В.Т. Лебедев¹

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

Обзор исследований в области синтеза, модификации, изучения строения различных углеродных структур и их производных, включая фуллерены и эндометаллофуллерены, наноалмазы и графены в водорастворимых формах для перспективных применений в диагностике и терапии социально значимых заболеваний. Анализ соотношений между структурой и функциональными биомедицинскими свойствами по данным нейтронного и синхротронного рассеяния и биомедицинских тестов для углеродных наноразмерных объектов.

Обсуждаются возможности поляризованных нейтронов [1] для тонкой диагностики углеродных структур с инкапсулированными атомами металлов, обладающими магнитными моментами, и эффекты упорядочения диамагнитных фуллеренолов в водных растворах при наличии в их окружении парамагнитных эндометаллофуллеренов во внешнем магнитном поле, что моделирует условия сеансов магнито-резонансной томографии в медицинской диагностике с применением новых контрастирующих препаратов на основе углеродных структур.

1. В.Т. Лебедев, Ю.В. Кульвелис, В.В. Рунов, В.П. Седов, А.А Сжогина, Рассеяние поляризованных нейтронов в водных растворах фуллеренов в магнитном поле. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, (2014) (в печати).

Наноструктура металла антикоррозийной наплавки корпусов энергетических реакторов: данные нейтронного малоуглового рассеяния

*В.М. Лебедев¹, И.Н. Иванова¹, В.Т. Лебедев¹, В.В. Рунов¹, О.П. Смирнов¹,
Б.З. Марголин², А.М. Морозов², Н.Е. Пирогова²*

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

² *ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Россия*

В настоящее время в мировой и российской энергетике актуальной проблемой является продление срока службы корпусов реакторов на действующих блоках АЭС. Применяемый в настоящее время путь решения этой проблемы заключается в применении восстановительной термической обработки критических зон корпусов реакторов. К числу материалов корпуса реактора, подвергаемых воздействию восстановительного отжига, также относится антикоррозионная наплавка и материал внутри корпусных устройств (базовая композиция материалов X20Ni10Cr2B и X18Ni10Cr соответственно). Наплавка этого состава используется для корпусов реакторов ВВЭР-1000. Впервые обстоятельно механические и физико-химические исследования материалов наплавки были начаты в работе [1]. Характер процессов структурных превращений, происходящих в данных материалах и воздействующих на их механические, коррозионные свойства, радиационное охрупчивание, остается невыясненным.

В докладе представлены результаты изучения наноструктуры, фазового состава и магнитных свойств исходных необлученных конструкционных аустенитных нержавеющей сталей типа X20Ni10Cr2B и X18Ni10Cr и образцов, прошедших дополнительную термическую обработку при различных температурах отжига, неразрушающими методами рассеяния тепловых и холодных нейтронов с использованием Фурье-анализа. Эти результаты необходимы для выявления закономерностей структурных и фазовых превращений, вызывающих деградацию механических свойств, либо, напротив, улучшение функциональных свойств реакторных сталей.

1. Б.З.Марголин и др. Вопросы материаловедения, 2005, № 2 (42). С. 196.

Сенсоры рентгеновского и гамма-излучений на основе GaAs:Cr

А.Д. Лозинская¹, В.А.Новиков¹, О.П. Толбанов¹, А.В. Тяжев¹, А.Н. Зарубин¹

Томский государственный университет, Томск, Россия

На сегодняшний день наиболее перспективными полупроводниками для изготовления детекторов ионизирующего излучения являются высокоомные арсенид галлия (GaAs), теллурид кадмия (CdTe) и его твердый раствор ($Cd_xZn_{1-x}Te$). GaAs:Cr удовлетворяет основным требованиям, предъявляемым к материалам, используемым при создании детекторов ионизирующего излучения, а также является радиационно-стойким и более дешевым в производстве, по сравнению с CdTe. Детекторы из GaAs:Cr по спектротрическим характеристикам не уступают детекторам на основе CdTe или $Cd_xZn_{1-x}Te$ в диапазоне энергий от 10 до 30 кэВ, а также стабильны в работе и при больших интенсивностях излучений.

В работе представлен краткий обзор сенсоров ионизирующего излучения на основе GaAs:Cr с различной геометрией: планарные структуры, детекторные линейки и матричные сенсоры с различным размером единичных пикселей. Толщина активной области и размер единичного пикселя матричных сенсоров и детекторной линейки были выбраны в соответствии с условием эффекта малого пикселя [1]. На основе проведенных измерений амплитудного спектра и его анализа для каждой структуры сделан вывод о возможности применения детекторов в спектротрических системах.

1. Barrett H. H. et al. Charge transport in arrays of semiconductor gamma-ray detectors, Physical Review Letters V.75. (1995)

Синхротронно-нейтронные исследования аморфных Zr-Be сплавов

*В.Ю. Мурзин¹, Г.Ф. Сырых¹, Н.Н. Трофимова¹, А.А. Велигжанин¹,
Я.В. Зубавичус¹*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Металлические стекла (или аморфные сплавы) привлекают все больше внимания, особенно в том случае, если их можно получить в объемном виде (BMG, Bulk Metallic Glasses). При температурах выше температуры стеклования BMG затвердевают без кристаллизации, приводя к аморфной стекловидной структуре материала. Полученный таким образом материал обладает высокой прочностью на растяжение и имеет отличную стойкость к коррозии. Есть даже коммерческие версии BMG, содержащие Zr, Be, Ti, Cu, Ni, Al и другие металлы.

В нашей работе были исследованы образцы аморфных сплавов на основе Zr и Be, полученные методом быстрой закалки расплава на поверхности вращающегося медного диска в атмосфере гелия. Соотношение Zr/Be в серии образцов составляло 40:60, 50:50 и 70:30. Для анализа структуры мы использовали комбинацию синхротронных рентгеновских методов анализа (PDF, XANES и EXAFS) и нейтронной дифракции.

Все экспериментальные данные, полученные различными методами находятся в хорошем согласии друг с другом. Было обнаружено, что ближайшее расстояние Zr-Be почти такое же, как и в кристаллическом $ZrBe_2$, а координационное число монотонно убывает с увеличением содержания циркония в сплаве. Кроме того, ближайшие расстояния Zr-Zr также практически идентичны по всей серии, а координационное число возрастает с увеличением содержания циркония.

Подробный количественный анализ в настоящее время еще не завершен. В частности, мы планируем привлечь обратный метод Монте-Карло для поиска структур и полного набора парных корреляционных функций для аморфных сплавов, удовлетворяющих всем полученным экспериментальным данным. Также планируется изучить поведение стекол при различных температурах закалки.

**Повышение точности модельного описания взаимодействия
очень холодных нейтронов с алмазными нанопорошками**

А.Ю. Незванов¹, В.А. Артемьев², В.В. Несвижевский³

¹ *Московский государственный индустриальный университет, Москва, Россия*

² *НИИ Технологии материалов, Москва, Россия*

³ *Institut Max von Laue – Paul Langevin, Grenoble, France*

Интенсивное когерентное рассеяние очень холодных нейтронов (ОХН) на порошках алмазных наночастиц позволило создать наиболее эффективные отражатели ОХН [1–3]. Такие отражатели могут быть использованы как в технике физического эксперимента, так и для улучшения параметров источников холодных, очень холодных и ультрахолодных нейтронов, а также для извлечения, доставки и фокусировки таких нейтронов, и в других применениях.

Ранее экспериментальные данные по отражению нейтронов от алмазных нанопорошков и распространению нейтронов в нанопорошках качественно описывались простой моделью, учитывающей в борновском приближении когерентное рассеяние нейтронов на отдельных наночастицах [3]. Потери нейтронов при их взаимодействии с наночастицами описывались усреднёнными параметрами, ответственными за поглощение и неупругое рассеяние.

В настоящей работе точность модельного описания взаимодействия нейтронов с наночастицами улучшена. Вместо борновского приближения реализован точный квантовомеханический расчёт сечения рассеяния методом фазовых функций; учтён химический состав примесей в наночастицах; введена структура сечения рассеяния нейтронов на атомах водорода.

В дальнейшем предполагается учесть распределение наночастиц по размеру и форме; кластеризацию наночастиц; интерференционные эффекты при рассеянии нейтронов; уточнить оптические потенциалы. Предполагается продолжить теоретические и экспериментальные исследования неупругого рассеяния нейтронов на атомах водорода, и, соответственно, уточнить его описание.

Разработка адекватных расчётных моделей, с приемлемой точностью описывающих взаимодействие нейтронов с наноструктурированными материалами, необходима для достоверной интерпретации экспериментальных результатов и планирования практических применений отражателей нейтронов.

1. V.V. Nesvizhevsky, Phys. At. Nuc. 65, 400 (2002).
2. В.А. Артемьев, Ат. Эн. 101, 445 (2006).
3. E.V. Lychagin et al, Phys. Lett. B 679, 186 (2009).

**XPS и XANES исследования структуры пористого кремния
и композита por-Si/SnO_x**

С.Н. Несов, П.М. Корусенко, В.В. Болотов, С.Н. Поворознюк

Омский научный центр СО РАН, Омск, Россия

Пористый кремний (por-Si) является перспективным материалом для микро- и наносенсорике, однако стабильность его сенсорных характеристик невелика из-за процессов старения, проявляющихся в постепенном изменении его состава и свойств вследствие взаимодействия с окружающей средой. С целью практического использования развитых поверхностей и высокой чувствительности к химическим реагентам por-Si применяют методы стабилизации и модификации его характеристик с использованием термического, радиационного и других видов воздействия. Известны результаты успешного применения воздействия мощных импульсных ионных пучков (МИП) на структуры на основе слоев пористого кремния [1]. Однако механизмы и закономерности воздействия импульсных ионных пучков наносекундной длительности на структурно-фазовые превращения в por-Si существенно отличаются от вызванных большинством других видов воздействий, и на настоящий момент недостаточно изучены.

В настоящей работе рентгеновскими методами с применением синхротронного излучения (XPS и XANES), а также с использованием методов сканирующей и просвечивающей микроскопии исследовано влияние МИП на изменения структуры и фазового состава поверхностных слоев пористого кремния, а также композита por-Si/SnO_x, полученного методом магнетронного напыления олова.

Комплексом применяемых методов были установлены основные закономерности, протекающие в поверхностных слоях por-Si в зависимости от пористости. Показано, что скелетон образцов por-Si с высокой пористостью практически полностью прокисляется при данных режимах облучения. В образцах por-Si с меньшей пористостью и более крупными размерами скелетона и пор происходит формирование достаточно тонкого пассивирующего слоя диоксида кремния и перераспределения кислорода в приповерхностной области. В образцах композита por-Si/SnO_x наблюдается изменение структурно-фазового состояния олова: наблюдается увеличение количества дефектов и оборванных связей в матрице оксида олова. Исследования спектров валентных электронов с различным угловым разрешением показывает, что приповерхностная область облученного композита является более гомогенной по составу в отличие от исходного композита.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-08-98043-р_Сибирь_а.

1. В.В.Болотов, К.Е.Ивлев, П.М.Корусенко, С.Н.Несов, С.Н.Поворознюк, ФТТ 56, 6 (2014)

Порометрия наноразмерных пленок рентгеновским методом

Е.Г. Новоселова¹, И.С. Смирнов¹, И.С. Монахов², О.М. Касьянов²

¹ *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

² *Научно-исследовательский институт микроэлектроники и информационно-измерительной техники, Москва, Россия*

Известно более 60 методов исследования пористой структуры твердых тел, различающихся информативностью, пределами возможного использования и чувствительностью. Нанопористые материалы в настоящее время являются объектом интенсивных исследований в связи со своими многочисленными потенциальными применениями, которые включают тонкие пленки с низкой диэлектрической постоянной в микроэлектронике, мембраны и избирательные фильтры в биотехнологии, катализаторы в химической инженерии, чувствительные элементы в газовых сенсорах. Однако большинство из методов сталкиваются с непреодолимыми трудностями при анализе пористости наноразмерных пленок. Это обусловлено тем, что масса пленок субмикронной толщины не превосходит нескольких мкг, поэтому измеряемые в традиционной порометрии параметры (давление при адсорбции газа или изменение массы в гравиметрических методах) крайне незначительно изменяются при введении в поры конденсата.

Развиваемый метод определения пористости пленок наноразмерной толщины, основан на использовании сорбционного метода Кельвина [1] в сочетании с эффектом полного внешнего отражения рентгеновских лучей от гладких поверхностей [2]. Одновременное определение давления паров рабочего газа над образцом и количества адсорбата в нем (изменение плотности исследуемой пленки), позволяет определить общую пористость пленки. Анализ изотермических зависимостей адсорбции и десорбции молекул адсорбента позволяет определить распределение пор по размерам. В докладе описывается общая схема и конструкция экспериментальной установки, методика проведения измерений и расчетов.

Возможности метода показаны на примере измерений пористости наноразмерных пленок полиметилфенилсилоксана, нанесенных на стеклянные подложки.

1. Плаченков Т.Г. Порометрия. – С.-Пб: Химия, 1988.-176

2. А.Мишкетт, Оптика мягкого рентгеновского излучения. М.: Мир 1989, 351с.

Исследование функциональных керамических материалов методом спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов

К.А. Павлов^{1,2}, Е.В. Величко^{1,2}, В.Н. Забенкин¹, W.H. Kraan³, C.P. Duif³,
W.G. Bouwman³, З.А. Михайловская⁴, Е.С. Буянова⁴, С.В. Григорьев^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

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

³ Delft University of Technology, Delft, the Netherlands

⁴ Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Наличие и структура внутренних пор в функциональных керамических материалах существенно влияет на их физические свойства, такие как прочность, плотность и проводимость. Определение формы, размеров и относительного расположения пор является важной научной и технической задачей.

В данной работе была исследована серия образцов кислородно-ионных проводников на основе сложного оксида висмута и молибдена $\text{Bi}_{12.8}\text{X}_{0.2}\text{Mo}_5\text{O}_{34\pm\delta}$, допированного по подрешётке висмута. Образцы представляли собой керамические брикеты, спечённые при температуре около точки плавления (850°C), различающиеся легирующим металлом ($\text{X} = \text{Mg}, \text{Ba}, \text{Ca}, \text{Sr}$) и временем спекания (6, 20, 45 часов). Аттестация образцов методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) показала химическую однородность материалов и высокий контраст между веществом и межзёренным пространством. Определение размеров пор проведено методом спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (СЭМУРН). Из экспериментальных данных была получена корреляционная функция СЭМУРН $G(z)$, которая хорошо описывается функцией вида $\exp(-(z/\zeta)^D)$, где ζ – это средний размер поры, а D – показатель, характеризующий ее фрактальность.

Средний радиус пор ζ составил величину от 2.2(1) до 3.5(1) мкм в зависимости от химического состава и условий отжига. Установлен факт роста среднего размера пор в материале с увеличением времени спекания (до 30%). Показано отсутствие фрактальной структуры пор $D = 1.5(1)$. Полученные экспериментальные данные помогут оптимизировать процесс синтеза материалов на основе плотно спечённой керамики.

Исследование молекулярной и наноструктурной организации биологических тканей на примере различных структур волоса

*Г.С. Петерс¹, И.А. Старосельский¹, А.Ю. Грузинов¹, А.В. Забелин^{1,3},
А.Г. Малыгин², А.А. Вазина³*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Институт биохимии РАН, Москва, Россия

³ Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия

Волос является привлекательным для исследований ввиду доступности и отсутствия необходимости в подготовке образца, в частности, кристаллизации – в отличие от кристаллов, волос уже изначально структурирован [1,2]. Важной особенностью волоса является полифункциональность. Волос может служить для сохранения тепла, защиты от внешних воздействий, ориентации в пространстве и т. д.

Открытие и развитие техники на основе синхротронного излучения (СИ) вызвало новую волну интереса к структурным исследованиям. Преимущества СИ дали возможность сократить время эксперимента. На первый план вышли прикладные исследования тканей, к примеру, для медицинских нужд [3]. Нами уже была проведена диагностика возможных патологий животных с использованием волос [4].

В работе исследованы различные образцы волос человека и животных. Репрезентативная коллекция содержала сотни документированных образцов волос различной функциональной направленности. Нами было показано, что одна и та же ткань, выполняющая различные функции, дает в той или иной степени различающиеся рентгенограммы, показывающие адаптацию структур кератина к выполняемым функциям и внешним воздействиям.

1. W.T. Astbury et al. X-ray studies of the structure of hair, wool, and related fibres. I. General. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character. – 1932. – С. 75-101.
2. R.D.B. Fraser et al. Keratins: their composition, structure, and biosynthesis. – Charles C. Thomas, 1972.
3. V. James et al. Using hair to screen for breast cancer. Nature. – 1999. – Т. 398. – №. 6722. – С. 33-34.
4. Г.С. Петерс, А.А. Васильева, А.В. Забелин, А.Ю. Грузинов, Н.Ф. Ланина, А.Г. Малыгин, А.А. Вазина. SAXS/WAXS исследования ткани шерсти мутантных мышей. XX Национальная конференция по использованию Синхротронного Излучения «СИ-2014» 7 - 10 июля 2014 г. – Новосибирск, 2014. – С. 27-28.

Изучение структуры смешанных мицеллярных растворов на основе монотетрадецилового эфира гептаэтиленгликоля и додецилсульфата цезия методом малоуглового рассеяния нейтронов

А. Раевска^{1,2}, К. Менджицка³, Э. Хальман³, Д. В. Соловьев^{1,4}

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Национальный центр ядерных исследований, Свек-Отвоцк, Польша

³Гданьский политехнический университет, Гданьск, Польша

⁴Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) исследована мицеллизация в смешанных водных системах [1] на основе неионного поверхностно-активного вещества (ПВА) – монотетрадецилового эфира гептаэтиленгликоля ($C_{14}E_7$), и анионного ПВА - додецилсульфата цезия. Изучено поведение водных растворов $C_{14}E_7$ (концентрации 0.17%, 0.5%, 1%) при добавлении до каждого из них небольшого количества (три разные концентрации) классического анионного ПВА - додецилсульфата цезия (ДСЦ). Измерения МУРН были выполнены на дифрактомере ЮМО по времени пролета на импульсном реакторе ИБР-2, ОИЯИ, в Дубне. Специфические особенности этого дифрактометра были описаны в деталях ранее [2]. Нейтроны использовались для вектора рассеяния Q в диапазоне $0.007-0.4 \text{ \AA}^{-1}$ ($Q=4\pi \sin(\theta/2)/\lambda$, θ – угол рассеяния, λ – длина волны). Для всех образцов в качестве растворителя использовалась тяжелая вода, D_2O , чтобы достигнуть хороших контрастных условий. Первичная обработка данных была проведена с помощью программы SAS [3], а обработка результатов эксперимента была проведена при использовании программы PCG 2.02 (Австрия). Определены размеры и форму мицелл при изменении концентрации неионного ПВА - $C_{14}E_7$ и анионного ПВА – ДСЦ.

1. А. Раевска, К. Менджицка, Э. Хальман, Кристаллография 52, 811 (2007)

2. A. I. Kuklin, A. Kh. Islamov, V. I. Gordeliy, Neutron News 16, 16 (2000)

3. А. Г. Соловьев, Т. Н. Соловьева, А. В. Стадник и др., Сообщения ОИЯИ, Дубна, P-10- 2003-86

SynchrotronLike – исследовательский стенд на основе рентгеновского источника высокой яркости

С. Савельев¹, А. Гойхман¹, П. Ершов¹, И. Лятун¹, А. Снугирев¹, А. Турьянский²

¹*Балтийский федеральный университет, Калининград, Россия*

²*Физический институт РАН, Москва, Россия*

Осуществление подготовки специалистов начального и даже среднего уровня непосредственно на современных синхротронных установках не эффективна как в силу высокой стоимости времени работы на этих машинах, так и нацеленности станций этих устройств на решение «front edge problems», тогда как для указанных групп пользователей требуется возможность экспериментировать с достаточно изученными задачами.

Для разрешения указанной проблемы в БФУ, г.Калининград, создан исследовательский рентгеновский стенд – SynchrotronLike (SynchrotronLike.com).

Основу установки SynchrotronLike составляет источник MetalJet, с размером фокусного пятна до 5 микрон, который в настоящее время по спектральной яркости до 10^{12} фотонов/сек*стерадиан (0.1% $\Delta\lambda/\lambda$) занимает положение между синхротронами первого и второго поколения.

SynchrotronLike предоставляет возможность вести одновременную работу на рабочих станциях, оснащенных разнообразным оборудованием, начиная от высокоточных узлов крепления и юстировки до развитой системы детекторов различных типов. В частности:

Станция 0 (UXOS) – длина 3 метра с тремя типами детекторов является универсальной площадкой для реализации разнообразных рентгенооптических задач.

Станция 1 (XMFS)- многофункциональный канал с гониометром 0.5°, энергодисперсионными и одно-двух-координатными детекторами и монохроматорами. Предназначена для работ с относительной рефлектометрией, дифрактометрией, рентгеновским флуоресцентным анализом и пр.

Установки оснащены мощным программным обеспечением, решающим задачи управления, интерпретации полученных результатов, обучению в использовании рентгеновских методов и оборудования. Представленный комплекс обеспечивает возможности как по проведению исследований по широкому кругу задач, требующих применения рентгеновских методов, так и возможности эффективной подготовки высококвалифицированных специалистов в условиях максимально близких к работе мощных, но мало доступных синхротронных установок.

Работа выполнена при поддержке Министерства Образования и Науки Российской Федерации (грант № 14.Y26.31.0002, грант № 02.G25.31.0086)

Новая станция нейтронной радиографии и томографии

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

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

По сравнению с рентгеновской радиографией и томографией развитие нейтронных методов долгое время ограничивалось достаточно слабыми нейтронными источниками и медленным развитием детекторной техники для этого метода. Однако сейчас во всех ведущих мировых нейтронных центрах ведутся работы по созданию и развитию экспериментальных методов по нейтронной радиографии и томографии. В Дубне в Объединенном институте ядерных исследований в 2011 года начал работу модернизированный реактор ИБР-2, который не уступает по характеристикам зарубежным источникам нейтронов. С учетом важности нейтронных методов неразрушающего контроля, на 14 канале этого реактора построена экспериментальная станция для исследований с помощью метода нейтронной радиографии и томографии.

Составной вакуумированный коллиматор формирует выходной нейтронный пучок с размерами 200×200 мм и характеристическим параметром L/D [1] до 1920. Для регистрации нейтронов служит детектор на основе сцинтиллятора ZnS и охлаждаемой CCD матрицы с размером одного пикселя 9 мкм. Итоговое пространственное разрешение детекторной системы составляет ~ 200 мкм. Для проведения томографических экспериментов есть система гониометров с минимальным углом поворота 0.010. Высокий поток нейтронов на исследуемом образце определяет короткое время экспозиции до 10 секунд при нейтронных экспериментах, что в свою очередь, открывает широкие возможности для развития методов энергодисперсионной нейтронной радиографии [2] и исследований быстропротекающих процессов в реальном времени.

В докладе представлены некоторые результаты по исследованию объектов из различных сфер наук: палеонтологических, инженерных, минералогических, геофизических.

1. P. Vontobel, E.H. Lehmann, R. Hassanein, G. Frei. Neutron tomography: Method and applications // *Physica B: Condensed Matter*, 385–386, 2006, 475–480.)
2. W. Kockelmann, G. Frei, E.H. Lehmann, P. Vontobel and J.R. Santisteban. Energy-selective neutron transmission imaging at a pulsed source // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 578, 2007, 421–434.

Исследование силикатных стекол, допированных оксидами церия и титана с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов

С.А. Самойленко^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, Д.П. Козленко¹ Б.Н. Савенко¹,
Л.А. Булавин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Киевский национальный университет, Киев, Украина

Перспективными материалами для оптических приборов являются наноструктурные оксидные системы, в частности, силикатные стекла содержащие оксиды церия и титана. Такие стекла характеризуется высокой радиационной и термической стабильностью, что открывает широкие возможности их применений в промышленности и индустрии [1].

Добавление оксидов церия и титана обуславливает желто-оранжевую окраску, что не соответствует интегральной составляющей от парциального вклада отдельных ионов. Этот эффект можно объяснить формированием сложных Се-Ti-O кластеров, морфология и свойства которых пока не изучены. Для исследования структуры таких кластеров был проведен эксперимент по малоугловому рассеянию нейтронов [2].

В эксперименте исследовались силикатные стекла с различным содержанием оксидов. Установлено, что при повышении относительной концентрации $\text{CeO}_2/\text{TiO}_2$ средний размер кластеров возрастает, причем нелинейно. Установлена корреляция между структурными особенностями кластеров и оптическими характеристиками вышеуказанных стекол.

1. H. Chandler. Mater.Sci.Eng.R. 49, 113-155 (2005).

2. H. B. Stuhmann, N. Burkhardt, G. Dietrich, R. Jünemann, W. Meerwinck, M. Schmitt, J. Wadzack, R. Willumeit, J. Zhao, K. H. Nierhaus. Nucl. Instr. & Meth. A, 356 133 (1995).

Выживаемость фуллеренолов и эндометаллофуллеренолов при нейтронном облучении

А.А. Сжогина, В.А. Шилин, В.П. Седов

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Фуллеренолы и эндометаллофуллеренолы представляют собой водорастворимые полигидроксилированные фуллерены ($C_{2n}(OH)_x$) и эндометаллофуллерены ($M@C_{2n}(OH)_x$). Фуллеренолы и эндометаллофуллеренолы являются очень важными производными фуллеренов с точки зрения возможности их использования в медицинских целях [1].

Такой параметр как выживаемость (радиационная стойкость) фуллеренов, главным образом, определяет возможность их использования в условиях воздействия ионизирующего излучения. В ходе активации нейтронами разрушение эндометаллофуллеренов может проходить по трем, независимым друг от друга причинам. Во-первых, быстрые и тепловые нейтроны могут вызвать перемещение фуллерено-углеродного атома при столкновении. Во-вторых, кейдж может быть разрушен за счет энергии отдачи при захвате нейтрона инкорпорированным атомом, т.е. в результате реакции Сцилларда-Чалмерса. В-третьих, источником разрушения фуллеренолов и эндометаллофуллеренолов может служить повреждение γ -излучением в реакторе.

Большинство работ посвящено выживаемости фуллеренов и эндометаллофуллеренов, в то время как выживаемость фуллеренолов и эндометаллофуллеренолов исследована крайне мало.

В данной работе впервые была исследована выживаемость эндометаллофуллеренолов $Tb@C_{2n}(OH)_{38-40}$, $Sc@C_{2n}(OH)_{38-40}$, $Gd@C_{2n}(OH)_{38-40}$, $Fe@C_{2n}(OH)_{30-32}$, $Pr@C_{2n}(OH)_{38-40}$ и фуллеренолов $C_{60,70}(OH)_{28-30}$ при облучении потоком нейтронов $8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ в зависимости от времени облучения. Как и ожидалось, выживаемость $C_{60}(OH)_{28-30}$ оказалась выше, чем $C_{70}(OH)_{28-30}$, что можно объяснить влиянием симметрии молекулы на радиационную стойкость. Установлено, что выживаемость зависит от количества металл-содержащего компонента в эндометаллофуллереноле и от величины энергии отдачи. Полученные значения позволяют предположить, что основной вклад в разрушение эндометаллофуллеренолов вносит реакция Сцилларда-Чалмерса.

1. Eropkin M. Yu., Melenevskaya E. Yu., Nasonova K. V., Bryazhnikova T. S., Eropkina E. M., Danilenko D. M., and Kiselev O. I. Synthesis and biological activity of fullerlenols with various contents of hydroxyl groups // Pharmaceutical Chemistry Journal. 2013. V. 47(2). P. 87-91.

**Рентгеновские и синхротронные исследования
наноструктурированных систем**

В.Н. Сивков¹, С.В.Некипелов², А.А. Ломов³, О.В. Петрова¹

¹ Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия

² Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия

³ Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

Получение достоверной информации о физико-химических свойствах и строении наноструктурированных систем без их разрушения, включая электронную структуру занятых (валентных) и свободных (зона проводимости) состояний является актуальной задачей. Традиционный выбор методов ее решения основан на фундаментальном взаимодействии электронов, синхротронного излучения и нейтронов с веществом. Очевидно, что для решения такой задачи в первую очередь востребованы дифракционные методы, характеризующие структуру вещества: рентгеновские и нейтронные. Однако традиционные дифракционные исследования, основанные на рассеянии рентгеновских квантов и нейтронов, при переходе к наномасштабным размерам оказываются не информативными из-за размытия дифракционных пиков и требуют перехода к малоугловым измерениям и использования для обработки данных сложных теоретических расчетов. Поэтому при изучении объектов наноразмерного масштаба необходимо использовать комплементарные методы, в частности, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), спектроскопии фотопоглощения и квантового выхода внешнего рентгеновского фотоэффекта с применением ультрамягкого рентгеновского излучения (NEXAFS-спектроскопия). То есть методы, которые позволяют получать информацию о состоянии вещества на основе размеров межатомных связей и предсказать его атомно-молекулярный состав и кристаллическую структуру. Проведенные нами ранее исследования показали, что для ряда наноструктурированных материалов только комплементарное применение упомянутых дифракционных и спектральных методов позволяют получить исчерпывающую структурную информацию, что и определяет необходимость их совместного применения. В настоящей работе обсуждаются использование методов спектроскопии и дифракции рентгеновских лучей для решения проблемы диагностики ряда наноструктурированных систем: фуллеритов C_{60} и C_{70} после баротермической обработки, гетерокомпозитов (многостенные углеродные нанотрубки)/(пиролитический металл) и нанопористого кремния.

Работа выполнена в рамках двухсторонней программы Русско-Германской лаборатории на BESSY II и при финансовой поддержке проекта РФФИ № 12-02-00088-а, программы Президиума РАН 12-П-1-1014, программы фундаментальных исследований УрО РАН 12-У-1-1010.

Изучение мезоструктуры гидрогелей на основе бактериальной целлюлозы и полиакриламида методом МУРН

*Р. Ю. Смыслов¹, Г. П. Копица², А. Л. Буянов¹, А. К. Хрипунов¹,
И. В. Гофман¹, К. В. Ездакова², А. А. Ткаченко³*

¹ *Институт высокомолекулярных соединений РАН ФАНО, Санкт-Петербург, Россия*

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

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

Методом МУРН изучены структурные особенности композиционных гидрогелей на основе бактериальной целлюлозы и полиакриламида (БЦ–ПААм), которые перспективны для применения в медицине в качестве искусственных заменителей хрящевых тканей. Важной отличительной особенностью данного вида гидрогелей является анизотропия структуры, которая проявляется как при их набухании, так и при деформировании [1,2]. По данным СЭМ в гидрогелях имеются «туннельные» структуры, ориентированные преимущественно вдоль оси, перпендикулярной поверхности роста матричной нано-гель-пленки БЦ. Предположительно в их структуре также могут присутствовать упорядоченные и ориентированные области различного размера и формы. Экспериментальная проверка данного предположения весьма актуальна.

В рамках настоящей работы исследованы образцы гидрогелей, полученные при варьировании условий синтеза и методики подготовки для этого нано-гель-пленки БЦ. Соответственно, образцы отличались по содержанию в них БЦ, степени равновесного набухания, механическим характеристикам и степени анизотропии данных характеристик.

Измерения МУРН проводились на установке «ВЕКТОР» (реактор ВВР-М, Гатчина) в диапазоне переданных импульсов $3.4 \cdot 10^{-3} < q < 4.1 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$. Кривые рассеяния нейтронов были получены в двух геометриях прохождения пучка нейтронов через гидрогель: перпендикулярно и параллельно поверхности нативной поверхности нано-гель-пленки БЦ.

Анализ данных МУРН показал, что наблюдаемое рассеяние существенно зависит от ориентации образца по отношению к падающему пучку нейтронов, что явно свидетельствует о структурной анизотропии гидрогелей. Также установлено, что наибольшее рассеяние наблюдается для образца, демонстрирующего наиболее высокую степень анизотропии при набухании и при тестировании механических характеристик.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Фундаментальные исследования для разработки биомедицинских технологий" (ПРОЕКТ ФИМТ-2014-066).

1. А. Л. Буянов, И. В. Гофман, et al. J. Mech. Beh. Biomed. Mat. 102, 3 (2010).

2. А. Л. Буянов, И. В. Гофман, и др. Высокомолек. соед. А. 512, 55 (2013).

Комплексная радиационная диагностика и ее применение

В.А. Соменков

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Рассматриваются методы комплексных исследований с помощью проникающего излучения (нейтронная, синхротронная и гамма-лучевая диагностика) и применение этих методов в интересах различных отраслей науки и техники, включая материаловедение, гео- и биофизику, палеонтологию, медицину, археологию и пр.

Приводится описание установок и устройств, созданных для этих целей, и результаты выполненных исследований. Показано преимущество комплексного подхода при решении широкого круга задач и изучении различного типа объектов.

Работа поддержана РФФИ по гранту 12-02-00705а.

Кристаллическая структура флюоритоподобного соединения на основе $\text{Nd}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$, легированного свинцом

*Н.И. Сорокина¹, А.М. Антипин¹, О.А. Алексеева¹, Е.П. Харитонова²,
Е.И. Орлова², В.И. Воронкова²*

¹ Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

² Московский государственный университет, Москва, Россия

К проводникам со смешанной электронно-ионной проводимостью относятся сложные оксиды состава $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$ [1]. Состав этих соединений находится в пределах областей гомогенности флюоритоподобных твердых растворов в системах $\text{Ln}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$. Области гомогенности зависят от размера ионов Ln^{+3} , температуры синтеза, примесей и состава окружающей газовой фазы [2]. Кубическая структура молибдатов $\text{Ln}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$ подобна структуре $\text{CdTm}_4\text{Mo}_3\text{O}_{16}$ с удвоенной флюоритовой элементарной ячейкой ($a=10.99 \text{ \AA}$, пр.гр. $Pn-3n$) [3].

Твердофазным синтезом получены поликристаллические образцы $\text{Nd}_5\text{Mo}_3\text{O}_{16+\delta}$, легированные свинцом, и выращены монокристаллы методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве. Химический состав монокристаллов уточнен методом EDS-микроанализа (QUANTA 200 3D сканирующий электронный микроскоп). Структуру кристаллов исследовали с использованием CCD дифрактометра Xcalibur S фирмы Oxford Diffraction. Выбрана кубическая ячейка с параметром $a=11.042(1) \text{ \AA}$. В рамках пр.гр. $Pn-3n$ установлено, что атомы свинца находятся на расстоянии 0.24 \AA от позиции атомов Nd2, позиции Mo расщеплены на три – основную и две дополнительные. Впервые для данного семейства кристаллов методом PCA был установлен факт частичного замещения катионов Nd1 и Nd2 катионами Mo - выявлено присутствие в структуре атомов Mo вблизи позиций атомов Nd1 и Nd2 на расстояниях от 0.42 \AA до 0.80 \AA . Следствием частичного замещения катионов является установленное в процессе расшифровки структуры ($R=0.0143$, $R_w=0.0329$, $S=2.52$) расщепление позиций атомов кислорода O1 и O2 на несколько дополнительных и локализация на разностном синтезе электронной плотности междуузельного атома кислорода O3, который расположен в октаэдрических пустотах структуры. Таким образом, непрерывность сетки путей миграции кислорода в изученной структуре обеспечивается разупорядоченностью кислородной подрешетки, обусловленной перераспределением в структуре катионов Nd и Mo.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-02-00531а) и Программы фундаментальных исследований ОФН РАН.

1. P.H. Hubert, P. Michel, A. Thozet, C.R. Acad. Sc. Paris Ser. 1779, C276 (1973).

2. M. Tsai, M. Greenblatt, W.H. McCarroll, Chem. Mater. 253, 1 (1989).

3. J.B. Bourdet, R. Chevalier, et al., Acta Crystallogr. 2371, B 38 (1982).

Развитие методики полуколичественного микро-РФА с применением поликапиллярной рентгеновской оптики

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

Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия

Микро-РФА с применением двух рентгеновских поликапиллярных линз в конфокальной схеме позволяет исследовать пространственное распределение элементов в приповерхностных слоях образцов. В задачах определения двумерной «карты» химических элементов (elements' mapping) пространственное разрешение, равное размеру фокусного пятна (единицы-десятки микрометров), обычно является достаточным, тогда как для анализа крупных биологических клеток, включений в геологических породах необходимо (суб-)микронное разрешение [1]. Методики, основанные на решении уравнения

$$S(x, y, z, E) = \iiint N(X, Y, Z, x, y, z, E) * R(X, Y, Z, E) dXdYdZ, \quad (1)$$

где N – распределение флуоресцентного сигнала, S – измеренный сигнал флуоресценции от всего конфокального объема, R – аппаратная функция конфокальной схемы,

позволяют увеличить разрешение на порядок и определять вариации распределения элементов на расстояниях 1-2 мкм.

В литературе по микро-РФА [1, 2] слабо освещены вопросы, касающиеся способов решения некорректной задачи (1), не говоря уже о реализации алгоритмов. Для решения уравнения свертки в трехмерном случае можно воспользоваться вычислительным методом регуляризации, основанном на разложениях Фурье с эмпирически подбираемым фильтром Винера [3, с. 270], или другими способами, учитывающими больше априорной информации. Практически значимыми результатами в них являются устойчивое приближенное решение и определенная для него погрешность.

В работе на примере анализа модельных образцов показана удовлетворительная работа алгоритмов, составляющих основу полуколичественной микро-РФА методики, разрабатываемой в нашей лаборатории для применения в ряде актуальных проблем. Также описан способ определения аппаратной функции конфокальной схемы.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-02-00631.

1. I.Mantouvalou, W.Malzer, B.Kanngießner. Quantification for 3D micro X-ray fluorescence. Spectrochimica Acta Part B. 2012. Vol. 77. P. 9–18.
2. W.Malzer. 3D micro x-ray fluorescence analysis. The Rigaku journal. 2006. Vol. 23. P. 40–47.
3. А. Ф. Верлань, В. С. Сизиков. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Справочное пособие. Киев, изд-во «Наукова Думка», 1986.

Синхротронные исследования формирования нанокристаллов кремния в пленке SiO_x/Si

*Д.Е. Спири¹, В.А. Терехов¹, С.Ю. Турищев¹, О.В. Сербин¹, Д.И. Тетельбаум²,
А.И. Белов², А.Н. Михайлов², А.В. Ершов²*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород, Россия

Формирование нанокристаллов кремния (nc-Si) в матрице собственного оксида является важной задачей в наноэлектронике. Излучательная способность таких структур в ближней инфракрасной области позволит использовать их в кремниевой технологии оптической передачи сигнала. Наиболее распространенным способом формирования nc-Si в матрице SiO_2 является длительный термический отжиг пленок SiO_x на подложке Si, а главной проблемой - неконтролируемый рост размеров nc-Si в процессе отжига. Предварительная имплантация углерода в пленки SiO_x/Si может препятствовать росту nc-Si за счет сегрегации углерода на нанокристаллах кремния. В свою очередь, замена термического отжига на импульсно-фотонный отжиг также может ограничить чрезмерный рост nc-Si вследствие скоротечности процесса.

В данной работе были исследованы поверхностные слои пленок SiO_x/Si толщиной 300 нм после имплантации углерода и последующего импульсно-фотонного отжига (ИФО) методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES) с использованием синхротронных источников. Эта методика обладает высокой чувствительностью к локальному окружению атомов заданного сорта. Спектры в области края поглощения Si измерялись методом регистрации полного выхода электронов (квантовый выход, глубина анализа 5 нм) и полного выхода фотонов (флуоресценция, глубина анализа ~ 100 нм). Результаты измерения квантового выхода показали наличие исключительно SiO_2 на глубине до 5 нм вне зависимости от режимов отжига и дозы имплантации углерода. В то же время XANES Si $L_{2,3}$ спектры флуоресценции пленок SiO_x/Si после ИФО дозой 86 Дж/см² показали наличие на глубине (~ 100 нм) как элементарного кремния так и SiO_2 . Измерение спектров флуоресценции пленок SiO_x/Si после ИФО повышенными дозами (120 и 135 Дж/см²) дает резкий рост интенсивности спектра флуоресценции перед Si $L_{2,3}$ краем элементарного кремния с последующим падением сразу после края. Такое поведение спектрального хода флуоресценции мы связываем с аномальным эффектом обратного упругого рассеяния падающих фотонов на nc-Si, находящихся внутри пленки SiO_x/Si и имеющих размеры порядка длины волны (12 нм).

Таким образом, использование методики XANES с измерением полного выхода фотонов дает дополнительные диагностические возможности в изучении нанокристаллических систем на основе кремния.

Исследование атомной структуры биметаллических наночастиц Pt-Cu по данным EXAFS

В.В. Срабионян, В.В. Прядченко, Л.А. Авакян, Т.А. Ластовина, В.Е. Гутерман, Л.А. Бугаев

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В последние годы неуклонно растет интерес к получению новых композиционных материалов - катализаторов, содержащих наночастицы благородных металлов, изучению их структурных и функциональных характеристик. Такие материалы являются эффективными катализаторами в реакциях электровосстановления кислорода, электроокисления водорода и ряда органических соединений в водородкислородных топливных элементах. Их широкое применение сдерживается из-за использования больших количеств благородного металла и неустойчивости самого катализатора в процессе работы. Эти трудности могут быть преодолены путем создания биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка, где оболочка состоит из атомов благородного металла, а ядро – из атомов переходного металла. Методы получения таких наночастиц интенсивно разрабатываются в настоящее время [1-3]. При этом важной задачей является развитие методов диагностики биметаллических наночастиц. В качестве такого метода в настоящей работе используется EXAFS спектроскопия. Однако, существующие методики получения параметров локальной атомной структуры в столь сложных объектах из EXAFS спектров нуждаются в дальнейшем усовершенствовании, поскольку использование сложных моделей ближнего окружения поглощающих атомов требует введения большого числа параметров, которые сильно коррелируют друг с другом. Для получения структурных параметров биметаллических наночастиц Pt-Cu из EXAFS предлагается подход, основанный на исследовании изменений в перераспределении по коррелирующим параметрам неучтенных моделью фитинга вкладов в зависимости от разных весовых множителей k^n функции $\chi(k)$ и различных протяженностей Δk используемого интервала EXAFS спектра.

С помощью предложенного подхода определена доля атомов платины, находящихся в приповерхностном слое наночастиц Pt-Cu, синтезированных методами последовательного и одновременного осаждения атомов Pt и Cu на углеродный носитель до и после отжига, а также до и после кислотной обработки. Определены парциальные координационные числа N_{Pt-Pt} и N_{Pt-Cu} , на основе которых рассчитан параметр ближнего порядка.

С помощью метода кластерного моделирования, используя структурные параметры, полученные из EXAFS, построены кластерные модели изучаемых биметаллических наночастиц.

1. N. Leontyev, S. V. Belenov, V. E. Guterman, P. Haghi-Ashtiani, A. P. Shaganov, B. Dkhil, Journal of Physical Chemistry C. 115, 5429 (2011).
2. V. E. Guterman, T. A. Lastovina, S. V. Belenov, N. Yu. Tabachkova, V. G. Vlasenko, I. I. Khodos, E. N. Balakshina, J. of Solid State Electrochemistry. 18, 1307 (2013).
3. V.E. Guterman, A.Y. Pakharev, N.Y. Tabachkova, Applied Catalysis A: General. 453, 113 (2013).

Структурные исследования органических монослоев и биоорганических систем на поверхности жидкости и на твердых подложках

*Е.Ю. Терещенко^{1,2}, Ю.А. Дьякова¹, М.А. Марченкова¹, А.С. Серегин¹,
С.Н. Якунин², М.В. Ковальчук^{1,2}*

¹ *Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия*

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

Органические и биоорганические планарные системы являются перспективными материалами, которые применяются для решения широкого спектра фундаментальных и практических задач биологии, медицины, физики. В настоящее время интенсивно идут поисковые исследования направленные на создание органо-/биоорганических гибридных функциональных элементов электроники – различных детекторов, солнечных элементов, мемристоров, дисплеев и пр. Ключевой стадией в данных работах является контролируемое варьирование структуры разрабатываемых элементов. Также на основе таких систем могут создаваться адекватные модельные объекты для исследования биологических процессов, например, взаимодействия модельных биомембран с белками, токсичными веществами и лекарственными препаратами. Одна из основных задач для всех этих применений – структурные исследования органических систем на поверхности жидкости и на твердых подложках и изучение их структурных модификаций с течением времени или под действием внешних факторов.

В работе представлены результаты исследования процесса самоорганизации различных органических и биоорганических систем - фоточувствительных порфиринов-фуллереновых диад, модельных липидных пленок, белково-липидной системы, как на поверхности жидкости, так и на твердых подложках.

Сочетание ленгмюровской технологии, оптических методов контроля (брюстеровской микроскопии) и структурных методов диагностики (в частности, метода стоячих рентгеновских волн, рентгеновской рефлектометрии) позволяет изучать процесс формирования различных органических и биоорганических структур и их структурные перестройки. Примененный комплекс методов позволил выявить закономерности поведения изученных образцов с течением времени.

Работы выполнены при частичной поддержке гранта РФФИ №14-02-31431 мол_а и гранта Президиума РАН.

Идентификация дефектов структуры монокристаллов с применением цифровой обработки изображений

*В.А. Ткаль, И.А. Жуковская, Т.Д. Иванова, Ю.А. Мягкова,
Н.Н. Водолазова*

*Филиал Санкт-Петербургского государственного экономического университета,
Великий Новгород, Россия*

Наиболее распространенными методами диагностики качества монокристаллов остаются методы рентгеновской топографии и поляризационно-оптического анализа. Идентификация дефектов структуры проводится сопоставлением экспериментального контраста с ранее расшифрованным или с теоретическим контрастом, полученным по уравнениям Такаги или модифицированным уравнениям Инденбома-Чамрова. До настоящего времени регистрация контраста, формируемого дефектами структуры различного типа, проводится на высокочувствительные и высокоразрешающие ядерные фотопластинки и фотопленку. Его расшифровка и идентификация дефектов структуры затруднены из-за наличия зашумляющих факторов – слабой контрастности, фоновой неоднородности и зернистости фотоэмульсии. Это приводит к тому, что часть дефектов при контроле топограмм и фотоснимков не выявляется, невозможно разделить близкорасположенные дефекты, часто они идентифицируются не правильно.

Устранение зашумляющих факторов и повышение качества экспериментального контраста, а, следовательно, надежная идентификация дефектов структуры возможна применением цифровой обработки изображений. Цифровая обработка может быть основана на анализе яркостных или частотных (Фурье- и вейвлет-анализ) характеристик экспериментального контраста. Как показали проведенные исследования, наибольшую эффективность из всех разработанных методов показал дискретный вейвлет-анализ. Предложенные и апробированные цифровые методики позволили без потери основных особенностей контраста, формируемого дефектами, и информации о них устранить все зашумляющие факторы, надежно идентифицировать дефект и локализовать его в объеме монокристалла. Эффективность цифровой обработки резко возрастает при получении изображений с расширенным динамическим диапазоном – HDR-изображений. Введение количественных критериев оценки качества цифровой обработки позволило снизить субъективный фактор, обусловленный визуальной оценкой изображений.

Работа выполнена в Совместной с ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН научно-учебной лаборатории «Компьютерные технологии в дифракционной диагностике материалов» при поддержке гранта РФФИ № 12-02-00201.

1. В.А. Ткаль, et al., LAP LAMBERT Academic Publishing, Germany, (2012), 386 С, ISBN 978-3-8465-8855-0311

Структурные характеристики К-Ві-цитрата (Де-Нол) в твердой форме и водных растворах различной концентрации по EXAFS спектрам

С.В. Трубина¹, С.Б. Эренбург¹, Ю.М. Юхин²

¹ *Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия*

Научный интерес к исследованию соединений висмута вызван их высокой терапевтической активностью. Например, коллоидный субцитрат Ві (colloidal bismuth subcitrate – CBS) является фармакологически активной частью препарата Де-Нол и относится к числу наиболее эффективных противоязвенных препаратов. Соединения цитрата висмута могут иметь различный состав в зависимости от конкретных условий реакции, при этом даже небольшие изменения в гидратном составе могут приводить к существенным перестройкам структуры [1, 2]. Следует отметить, что кристаллы комплексов Ві-цитрат неустойчивы на воздухе из-за потери кристаллизационной воды [1]. Твердые формы CBS являются аморфными [3].

Методом EXAFS-спектроскопии проведено сравнительное исследование структуры CBS (Де-Нол) (рис. 1) в водных растворах различной концентрации и твердых формах. Спектры в районе L_{III} -края поглощения Ві получены с использованием СИ ВЭППЗ ИЯФ СО РАН. Установлено, что в водных растворах в координационную сферу атома висмута входят девять атомов кислорода с неравноценными расстояниями Ві-О (R) и различными координационными числами (N): ($R_1=2.12 \text{ \AA}$, (N1=2); $R_2=2.53 \text{ \AA}$, (N2=1); $R_3=2.73 \text{ \AA}$ (N3=3); $R_4=2.92 \text{ \AA}$, (N4=3)). При разбавлении раствора в 5 и 10 раз межатомные расстояния Ві-О несколько уменьшаются (2.11; 2.48; 2.67; 2.89 \AA соответственно). По данным МУРР установлено, что при разбавлении раствора размеры коллоидных частиц CBS увеличиваются с 22 \AA для концентрированного раствора до 26 \AA для раствора, разбавленного 1:4. Структурные данные (межатомные расстояния), полученные методом EXAFS для коллоидных частиц хорошо соответствуют данным рентгеновской дифракции для кристаллов К-Ві-цитрата, запаянных в капиллярах с маточным раствором. Структура твердых форм CBS (порошки) отличается от соответствующих структур в растворах. В твердых порошках в окружении атома висмута находятся ~ 3 атома кислорода на различных расстояниях (2.1 – 2.9 \AA).

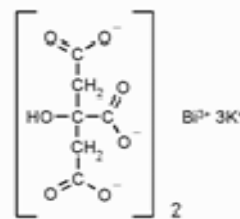


Рис.1. Трикалийевый дицитрат висмута

1. А.С. Анцышкина, Г.Г. Садиков и др. Журн. неорг. химии, 2006, 51, 423.
2. Ю.М. Юхин, Ю.И. Михайлов. Химия висмутовых соединений и материалов. – Новосибирск: Изд. СО РАН, 2001. – 360с.
3. Eiji Asato, Kosho Katsura, Masahiro Mikuriya et al. Inorg. Chem., 1995, 34, 2447.

**Спектромикроскопические исследования
массивов субмикронных столбиков никеля в матрице SiO₂
с использованием синхротронного излучения**

*С.Ю.Турищев¹, Е.В.Паринова¹, Р.Ю.Овсянников², Ф.Кронаст²,
Ю.А.Федотова³, А.В. Мазаник³, Е.А.Стрельцов³, Н.В.Малащенко³,
А.К.Федотов³*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Гельмгольц центр-Берлин, Берлин, Германия

³ Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

В работе представлены исследования синхротронными методами спектроскопии поглощения и фотоэлектронной эмиссионной микроскопии массивов столбиков Ni сформированных трекинговым методом, при электрохимическом осаждении металла из раствора NiSO₄ в поры SiO₂ субмикронного диаметра. Диэлектрическая матрица была получена химическим травлением термической пленки SiO₂ толщиной 1 мкм, облученной высокоэнергетическими ионами золота (380 МэВ), с целью формирования в ней треков после пролета ионов.

Макроскопические XANES исследования локального окружения атомов Si, Ni и O в поверхностных слоях массивов Ni столбиков выполнены на оборудовании синхротронных центров BESSY II (Гельмгольц центр-Берлин, Германия) и SRC (Университет Висконсин-Мэдисон, США). Спектромикроскопические исследования (метод PEEM), включая данные по распределению остаточной намагниченности были получены с использованием излучения BESSY II. Данные PEEM были получены путем регистрации электронного выхода в области ближней тонкой структуры L_{2,3} края рентгеновского поглощения Ni при комнатной температуре.

Продемонстрирована эффективность применения метода PEEM для характеристики выбранных объектов при использовании полей зрения в 20 - 3 мкм, что позволило получать информацию с участков поверхности диаметром до нескольких нанометров. Показано формирование столбиков металлического Ni со средним диаметром ~ 500 нм. В тоже время, поверхность, незанятая столбиками (матрица оксида кремния), содержит в небольших количествах остаточные загрязнения, включающие оксиды никеля. Столбики формируются как единично, так и группами, от трех до свыше пятнадцати, образуя островки, размером не превышающие 7 мкм, в которых, тем не менее, возможно выделить отдельные столбики того же диаметра. Показано формирование соединительной перегородки металлического Ni, с размерами ~ 300 x 50 нм, преимущественно соединяющей столбики. Распределение остаточной намагниченности в целом свойственно металлическому никелю, в области перегородки оно нулевое.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2014-2016 годы (проект № 1606, задание № 3.1868.2014/К).

**Программный комплекс для подготовки экспериментов
на универсальном нейтронном дифрактометре**

А.Н. Тюлюсов^{1,2}, Н.О. Елютин^{1,2}, Д.В. Львов^{2,1}

¹ НИЯУ «Московский инженерно-физический институт», Москва, Россия

² Институт теоретической и экспериментальной физики НИЦ КИ, Москва, Россия

Подготовка экспериментов на Универсальном нейтронном дифрактометре требует предварительных теоретических оценок как параметров используемых пучков, так и предполагаемых результатов измерений. С целью решения указанной задачи был создан набор программных продуктов, которые позволяют рассчитывать коэффициенты дифракционного отражения и пропускания тепловых нейтронов на совершенных и мозаичных кристаллах. Комплекс учитывает произвольные толщины, длины поглощений и длины волн в пределах теплового спектра. В основе расчетных алгоритмов лежит динамическая теория рассеяния нейтронов [1]. Кроме этого возможно рассчитывать инструментальные линии двухкристальных монохроматоров в параллельной и антипараллельной компоновке, устройств поворота пучка, отражение от кристаллов с пропилом. Также было реализовано моделирование экспериментальных результатов по малоугловому рассеянию с модельными спектрами в методиках двухкристального спектрометра и Уоррена.

Подготовка опытов, обработка результатов измерений и их интерпретация с помощью описанных программ были апробированы в работах [2,3]. Также компоненты программного комплекса были использованы при разработке новых экспериментальных схем и предложении возможных исследований [4,5].

При создании комплекса использован стандартный Fortran, при этом все программы исполнены в виде консольных приложений. Отсутствие графического интерфейса может быть недостатком, но таким образом достигается полная платформонезависимость и переносимость.

1. Ю.Г. Абов, Н.О. Елютин, А.Н. Тюлюсов, ЯФ, 65, 1989 (2002).
2. N. O. Elyutin, D. V. Lvov, A. N. Tyulyusov, Cryst. Rep., 49(S1), 55 (2004)
3. Н.О. Елютин, Д.В. Львов, Ю.И. Смирнов, А.Н. Тюлюсов, ПТЭ, 4, 5 (2007).
4. Н.О. Елютин, Д.В. Львов, А.Н. Тюлюсов, ФТТ, 55, 1041 (2013)
5. N. O. Elyutin, D. V. Lvov, A. N. Tyulyusov, Cryst. Rep., 56, 1200 (2011)

Атомное и электронное строение нитевидных нанокристаллов SnO₂ по данным синхротронных исследований

*О.А.Чувенкова¹, Э.П.Домашевская¹, С.В.Рябцев¹, Ю.А.Юраков¹,
Р.Овсянников², Yitao Cui³, Jin-Young Son³, Hiroshi Oji³, Narayan Appathirai⁴,
С.Ю.Турищев¹*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Helmholtz-Zentrum Berlin, Berlin, Germany

³ Japan Synchrotron Radiation Institute, Kouto, Japan

⁴ Synchrotron Radiation Center, Stoughton, USA

Нитевидные кристаллы (НК) SnO₂ отличаются повышенной чувствительностью к газам, что делает этот материал перспективным и чрезвычайно актуальным для использования в области газовой сенсорики. Применение поверхностно чувствительных методов диагностики и характеристики атомного и электронного строения особо эффективно при исследовании НК субмикронных и нанометровых сечений ввиду существенно большего вклада поверхности по отношению к объему этих объектов. НК SnO₂ субмикронных и нанометровых сечений были получены с использованием метода газотранспортного синтеза в Воронежском госуниверситете. Комплексное изучение атомного и электронного строения НК проводилось с использованием методов: спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения XANES, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии XPS и HAXPES в ультрамягкой и жесткой области спектра соответственно, фотоэмиссионной электронной микроскопии (PEEM). Использовалось излучение трех синхротронных центров: BESSY II (Германия), SPring-8 (Япония) и SRC (США).

Методами HAXPES и XPS уточнена энергия связи оксида олова SnO. Впервые зарегистрирован M_{4,5} край поглощения XANES химически чистого металлического олова, после in-situ механического удаления естественного поверхностного оксида, сдвинутый на ~ 5 эВ в низкоэнергетическую область по отношению к главным краям поглощения оксидов олова. Поверхность синтезированных НК SnO₂ (~ 1 нм) покрыта нанослоем естественного оксида олова. В электронной структуре НК зафиксированы локализованные состояния дефектов решетки в запрещенной зоне на расстоянии ~ 2.6 эВ от дна зоны проводимости, соответствующего главному краю поглощения Sn M_{4,5} диоксида олова. Продемонстрировано применение метода PEEM для диагностики нитевидных кристаллов SnO₂.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2014-2016 годы, проекты № 1606 и 757, программы стратегического развития Воронежского государственного университета.

МУРР-исследования твердого раствора GaAs_{0.7}Se_{0.3} при прикраевых значениях длины волны пучка

*М.Д. Шарков, М.Е. Бойко, А.В. Бобыль, А.М. Бойко, Н.С. Будкина,
А.Г. Панфилов, С.Г. Конников*

Физико-технический институт РАН, Санкт-Петербург, Россия

При проведении рентгенодифракционных измерений (РД, МУРР) длина волны анализирующего пучка может быть выбрана таким образом, что излучение будет интенсивно поглощаться одним из типов атомов. Так происходит в случае, когда энергия фотонов пучка незначительно превышает энергию края поглощения для одного из типов атомов, содержащихся в образце. В этом случае измеренный дифракционный сигнал (РД или МУРР) будет формироваться главным образом за счет фрагментов образца, не содержащих данного элемента. По данной причине методики МУРР и РД с использованием прикраевыми величинами длины волны пучка позволяют определять соответствие между, с одной стороны, формой и размерами зерен (доменов) в образце и, с другой стороны, их химическим составом.

С помощью метода прикраевого МУРР был изучен образец, как предполагалось, твердого раствора арсенида-селенида галлия GaAs_{0.7}Se_{0.3}/GaAs. От данного образца были получены кривые МУРР при трех величинах энергии пучка:

- 11.89 кэВ (1.043 Å), что незначительно выше К-края As (11.87 кэВ);
- 12.66 кэВ (0.979 Å), что незначительно выше К-края Se (12.65 кэВ);
- 8.05 кэВ (1.54 Å), что является типичной для рентгено-дифракционных измерений Cu K_{α1}-линией.

Анализ полученных данных МУРР показал, что в образце образуется мозаичная структура из тонких ячеек, параллельных поверхности подложки. Определены пространственные характеристики и химический состав двух разных компонент образца GaAs_{0.7}Se_{0.3}: GaAs (ячейки примерно 350×350×25 нм) и GaSe (ячейки примерно 350×350×15 нм). Показано, что исследуемый образец может включать в себя компоненты с линейной геометрией, не содержащие мышьяка.

Таким образом, сравнение данных МУРР, полученных при трех разных значениях длины волны пучка, позволило установить связь между размерами и химическим составом двух разных компонент, формирующих образец GaAs_{0.7}Se_{0.3}.

Использование молекулярно-динамического моделирования и методов нейтронного рассеяния в исследовании структурно-функциональных свойств биомакромолекул

А.В. Швецов^{1, 2}, Д.В. Лебедев¹, В.В. Исаев-Иванов¹

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

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

Развитие современных методов молекулярного моделирования, таких как метод молекулярной динамики (МД) позволяет создавать реалистичные модели поведения биомакромолекул и их комплексов размером до нескольких сотен килодальтон, которые содержат как сведения о предполагаемой полноатомной структуре соответствующих макромолекулярных систем в растворе, так и информацию о конформационной подвижности макромолекулярных комплексов на временах в десятки и сотни наносекунд. Интерпретация экспериментальных данных малоуглового нейтронного рассеяния (МУРН) и нейтронного спин-эхо (НСЭ) в контексте таких моделей придает результатам моделирования необходимый экспериментальный базис и открывает возможности выбора реалистичной модели при наличии различных альтернативных результатов компьютерных симуляций.

Для учета конформационной подвижности при расчете спектров МУРН была разработана утилита `g_sans` [1], которая входит в программный пакет GROMACS. Также было продемонстрировано использование предполагаемого подхода на комплексах белков RecA и RecX, что, в частности, позволило восстановить полноатомную структуру комплекса белка RecX на одонитевой ДНК [2].

1. A.V. Shvetsov et. al. Journal of Surface Investigation X-ray Synchrotron and Neutron Techniques, 6 (2013)
2. A.V. Shvetsov et. al. FEBS Letters, 588, 6 (2014)

Синтез и радиационная стойкость фуллеренов и их производных

В.А. Шилин, В.Т. Лебедев, В.П. Седов, А.А. Сжогина

Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Представлен обзор проблем радиационной стойкости и потенциальных применений радиофуллеренов и производных для научно-исследовательских и прикладных целей, включая радиохимические технологии, биомедицинские задачи [1], такие как использование специальных радиоактивных меток на основе фуллеренов и эндометаллофуллеренов (ЭМФ), когда количество анализируемого биоматериала предельно ограничено, а стандартные аналитические средства (спектроскопические, химические) неприменимы.

В этой связи обсуждаются различные способы получения радио-ЭМФ [2], в частности, путем облучения ЭМФ быстрыми нейтронами в зоне реактора применительно к результатам, полученным в ФГБУ ПИЯФ для углеродных структур, синтезированных методом электродугового испарения металло-графитовых электродов с оксидом гадолиния на основе разработанной авторами производительной технологии.

Представлены результаты гамма-спектроскопических и физико-химических исследований выживаемости целого ряда углеродных структур и водорастворимых производных (C_{60} , C_{70} , $C_{60}(OH)_{30}$, $C_{70}(OH)_{30}$, $Gd@C_{2n}$) в условиях облучения потоками быстрых нейтронов до флюенсов $\sim 10^{17}$ н/см². Авторами показано, что устойчивость фуллеренов, ЭМФ и фуллеренолов к облучению зависит от факторов симметрии, размеров и формы углеродных молекул, электронной структуры углеродной клетки, локализации атомов металла внутри нее, присутствия некоторых примесей в облучаемых фуллеренах и ЭМФ, степени и методологии гидроксирования в случае фуллеренолов [3-5].

1. Moro L., Ruoff R.S., Becker C.H., Lorents D.C., Malhotra R. Studies of metallofullerene primary soots by laser and thermal desorption mass spectrometry J. Phys. Chem. 97 (1993).
2. Sueki K, Akiyama K., Zhao Y. L., Ito I., Ohkubo Y., Kikuchi K., Katada M., Nakahara H. Systematic study of lanthanoid endohedral metallofullerenes: Production yields, HPLC retention time and reactor irradiation effects. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 255, № 1 (2003).
3. Nikolaev I.V., Lebedev V.T., Grushko Yu.S., Sedov V.P., Shilin V.A., Török Gy., Melenevskaya E.Yu. Ordering of hydroxylated fullerenes in aqueous solutions. Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures. 2012. V.20. Iss. 4-7. P. 345-350.
4. Лебедев В.Т., Грушко Ю.С., Седов В.П., Шилин В.А., Козлов В.С., Орлов С.П., Сушков П.А., Колесник С.Г., Сжогина А.А., Шабалин В.В. Исследование радиационной стойкости фуллеренов при облучении быстрыми нейтронами. ФТТ. 2014. Т.56. Вып.1. С. 176-179.
5. Седов В.П., Сжогина А.А. Способ получения водорастворимых производных фуллеренов. Заявка на изобретение №2014113248, приоритет от 26.05.2014.

Исследование влияния процесса травления на кривые перемагничивания ферромагнитных инвертированных опалоподобных структур

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

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

² Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

Методом SQUID–магнитометрии исследовалась пленка инвертированной опалоподобной структуры (ИОПС) на основе кобальта с толщиной 13 мкм. Пленка синтезирована на основе матрицы, сформированной из полистирольных сфер диаметром порядка 550 нм, уложенных в ГЦК структуру, путём заполнения пустот кобальтом в поликристаллическом состоянии (Co ИОПС) [1]. Пленка представляет собой ажурную сетку из октаэдрических и тетраэдрических элементов, соединенных перемычками. Предполагается, что магнитные свойства пленки зависят от толщины перемычек. Для проверки этой гипотезы предпринята попытка утонить перемычки погружением плёнки в раствор 20 мл азотной кислоты и 80 мл метанола на время 1, 2 и 4 секунды.

Кривые перемагничивания измерялись во внешнем магнитном поле в диапазоне $-5 \div 5$ Тл, которое прикладывалось в плоскости (0°) и перпендикулярно (90°) плёнке. Экспериментально кривые были перенормированы с учётом размагничивающего фактора, обусловленного анизотропией формы образца. Были определены критические поля: H_C – коэрцитивная сила, H_{C2} – точка расхождения кривых прямого и обратного намагничивания и H_{C3} – точка насыщения, и построены зависимости их от времени травления образцов (рис. 1).

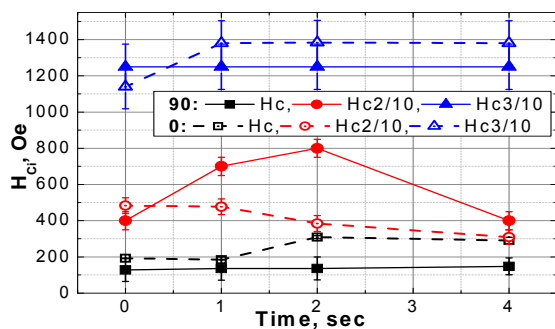


Рис. 1. Зависимость критических полей от времени травления ИОПС на основе Co толщиной 13 мкм

Из рисунка 1 видно, что значение H_C в плоскости плёнки увеличивается со временем реакции, в перпендикулярной же геометрии не меняет своего значения. Величина H_{C2} в перпендикулярной геометрии сдвигается в область больших полей, но имеет излом в точке $T=2$ с и резко падает. Это значит, что в точке $T=4$ с перемычки в образце значительно утонились. В плоскости плёнки значение H_{C2} монотонно убывает, значит, в этой геометрии кривые перемагничивания становятся более «квадратичными» и плёнка перемагничивается быстрее. Поле насыщения плёнки H_{C3} не зависит от времени травления.

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

Исследование гликопротеина глюкоамилазы из *Aspergillus awamori* с помощью малоуглового нейтронного рассеяния

А.Е. Шмидт¹, А.В. Швецов¹, А.И. Куклин^{2, 3}, Д.В. Лебедев¹, М.А. Суржик¹,
В.В. Исаев-Иванов¹

¹Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

²Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

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

Методами молекулярного моделирования нами была построена полная модель глюкоамилазы с учетом N- и O-гликозилирования. Эксперименты МУРН показали, что форма спектров рассеяния сильно зависит от точки контраста, что указывает на мультикомпонентную систему с разными плотностями рассеяния. Это подтверждается тем, что, в то время как для большинства белков точка компенсации составляет около 40% D₂O, результаты измерений указывают на минимум интенсивности рассеяния при рассеивающей плотности растворителя, близкой к 48% D₂O.

Радиус гирации частиц составлял около 31 Å в D₂O буфере и 38 Å в буфере с H₂O. Первое значение близко к ожидаемому для негликозилированного мономера глюкоамилазы. Существенно большее значение радиуса гирации в легководном буфере, вероятно, связано с изменением вклада гликозидной части в рассеяние при таком значении контраста. В экспериментах с использованием МУРР было получено промежуточное значение радиуса гирации около 33 Å, что обусловлено различиями относительного контраста белковой и гликозидной части при рассеянии нейтронов и рентгеновских лучей.

Полученные данные указывают на значительный вклад гликозилирования в рассеяние и могут быть использованы для верификации существующей полноатомной модели белка GA и ее дальнейшей модификации.

1. Aleshin A.E. et al. *J. Biol. Chem.* 1994, 269, 15631-15639

2. Sorimachi K. et al. *J. Mol. Biol.* 1996, 259, 970-987

3. Jørgensen A.D. et al. *J. Biol. Chem.* 2008, 283, 21. 14772-14780

Диффузия на границах раздела GaN/AlN- многослойных квантовых ям по данным EXAFS спектроскопии

С.Б. Эренбург¹, С.В. Трубина¹, К.С. Журавлев², Т.В. Малин²

¹ *Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия*

Большая величина параметра разрыва разрешенных энергетических зон на границе - «квантовая яма (КЯ) – барьерный слой», достигающая в гетеропаре GaN/AlN рекордных для подобных структур 2 эВ, позволяет конструировать электрооптические переключатели и фотоприемники. Работа подобных функциональных элементов для среднего и ближнего ИК спектральных диапазонов основана на межподзонных электронных переходах в квантовых ямах (КЯ) или квантовых точках (КТ).

Методом МЛЭ синтезированы многослойные образцы с предельно узкими GaN КЯ в матрице AlN. Для всех образцов получены спектры фотолюминесценции, с использованием методов EXAFS- спектроскопии [1], электронной микроскопии высокого разрешения, малоуглового рассеяния определены параметры микроструктуры, установлена их связь с морфологией GaN/AlN сверхрешеток, в соответствии с ранее полученными результатами [2,3]. Обнаружено влияние условий роста и толщины сверхрешеток на перемешивание в приграничных слоях и их оптические свойства.

Установлено, что в тонких слоях расстояния Ga-N и Ga-Ga на 0.02 - 0.03 Å меньше, чем в массивном GaN, что, по-видимому, связано с упругими деформациями в них. Обнаружено заметное диффузионное перемешивание на границах раздела, которое растет с увеличением температуры нанесения слоев. Для идеальных сверхрешеток с числом слоев GaN: 3 ML, 4 ML и 5 ML - соответствующие координационные числа Ga-Ga: 10.3, 10.5 и 10.8. Установлено, что для образцов, содержащих весьма тонкие слои (3ML), перемешивание Ga-Al в граничном слое составляет порядка 25; 30; 35% для систем, выращенных при температурах 795°C, 845°C и 895°C, соответственно.

1. S.B. Erenburg, S.V. Trubina, N.V. Bausk *et al.*, Journal of Physics: Conference Series, 2009, 190, 012131, doi:10.1088/1742-6596/190/1/012131

2. K. Zhuravlev, T. Malin, S. Trubina S. Erenburg, L. Dob³, B. Pecz, V. Davydov, A. Smirnov, and R. Kyutt. Phys. Status Solidi C, 2013, 10, No. 3, 311–314

3. С.Б. Эренбург, С.В. Трубина, К.С. Журавлев, Т.В. Малин, Б. Печ. Изв. АН, сер. физ., 2013, 77, N9, 1312-1316

Application of neutron diffraction and X-ray computed tomography to the structural characterization of rocks

T.I. Ivankina¹, O.G. Duliw²

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

² *University of Bucharest, Department of Atomic and Nuclear Physics, Bucharest, Romania*

Qualitative microstructural and texture analysis were used in order to characterize representative microstructure of biotite gneiss implying modal composition of the sample, crystallographic preferred orientations (CPO) of the main rock-forming minerals and their morphology (quantitative descriptions of grain shape and size). The cylinder-shaped sample was prepared from a core segment recovered from 1844 m depth of the Outokumpu scientific drill hole (Finland). The rock sample is homogeneous with pronounced foliation and lineation and made up by 39.6 vol.-% quartz, 36.9 vol.-% plagioclase and 23.4 vol.-% biotite. The CPO measurements were performed under ambient conditions using the time-of-flight (TOF) texture diffractometer SKAT of the JINR at Dubna, Russia. The SKAT diffractometer has the possibility to measure very large sample (more than 100 cm³) to achieve representative grain statistics and possesses high resolution that may be necessary to define very sharp grain orientation distributions. X-ray computed tomography (CT) in its 3D variant was used to visualize the internal structure of sample with a resolution of about 50 microns. Quantitative CPO analysis using neutron diffraction reveals very strong preferred orientations of biotite grains normal to foliation. The longest projection of biotite grains in the image CT plane parallel foliation was described by the particle fabric orientation distribution function (ODF) which seems to be similar to the ODF notated in the quantitative texture analysis. The trends of the results of the neutron diffraction texture analyses were consistent with those of the X-ray imaging. Nevertheless, the systematic studies are further required for the quantitative comparison of the obtained microstructural parameters between the computed tomography and the neutron diffraction.

Список участников

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Aleksanyan Eduard	YERPHI	aeduard@fi.tartu.ee	107
Alperovich Igor	ЮФУ	igor.alper@gmail.com	172
Chudoba Dorota	JINR FLNP	dmn@nf.jinr.ru	108
Gordeliy Valentin	IBS	valentin.gordeliy@gmail.com	
Hetmanczyk Joanna	JINR FLNP	joanna.hetmanczyk@uj.edu.pl	173
Kučerka Norbert	JINR FLNP	kucerka@nf.jinr.ru	38
Luczynska Katarzyna	JINR FLNP	k.luczynska@ichtj.waw.pl	174
Mignot Jean-Michel	CEA-CNRS Laboratoire Léon Brillouin	jean-michel.mignot@cea.fr	15
Mikula Pavol	Nuclear Physics Institute ASCR	mikula@ujf.cas.cz	109
Zaw Lin Kyaw	СПбГУ	kyawzawlinn.49@gmail.com	110
Авакян Леон Александрович	ЮФУ	laavakyan@sfnedu.ru	175
Авдеев Михаил Васильевич	ОИЯИ	avd@nf.jinr.ru	31
Авсиевич Артур Александрович	СПбГПУ	artur.avsievich@gmail.com	
Агафонов Сергей Сергеевич	НИЦ КИ	agaph@mail.ru	176
Аксенов Виктор Лазаревич	ПИЯФ НИЦ КИ	dir@pnpi.spb.ru	
Аксенов Сергей Николаевич	ИЯИ РАН	axenov@inr.ru	
Актерский Андрей Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	aktersky@gmil.com	
Алексеев Павел Александрович	НИЦ КИ	pavel_alekseev-r@mail.ru	25

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Алексеева Ольга Анатовна	ИК РАН	olalex@inbox.ru	
Алигулиева Хаяла Вагиф	НАН Азербайджана	xayala-firuza@mail.ru	
Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@lns.pnpi.spb.ru	86
Амарантов Сергей Владимирович	ИК РАН	amarantov_s@mail.ru	177
Андреева Марина Алексеевна	МГУ	Mandreeva1@yandex.ru	43
Андроникова Дарья Александровна	ФТИ РАН	andronikova.daria@gmail.com	
Анисимов Илья Игоревич	ГНЦ РФ - ФЭИ	litstat@gmail.com	178
Антоненко Таисия Алексеевна	МГУ	taisiya.antonenko@mail.ru	179
Арефьев Михаил Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	arefievm@mail.ru	
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dmitri.aristov@gmail.com	17
Арутюнян Вачаган Викторович	Ереванский Физический Институт	vharut@yerphi.am	180
Астахов Анатолий Сергеевич	ТОИ ДВО РАН	astakhov@poi.dvo.ru	181
Афонин Алексей Алексеевич	ИЯИ РАН	afonin@inr.ru	
Бабанов Юрий Александрович	ИФМ УрО РАН	babanov@imp.uran.ru	182
Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	66
Балашою Мария Александровна	ОИЯИ	balas@jinr.ru	33
Балашою-Гаина Александра-Мария Алексеевна	ОИЯИ, МГУ	alexandra@balasoiu.com	183
Баталов Лев Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	zlokor88@gmail.com	111
Белозерова Надежда Махмудовна	ОИЯИ	NMBelozerova@mail.ru	112

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Белушкин Александр Владиславович	ОИЯИ	belushk@nf.jinr.ru	113
Беляков Владимир Алексеевич	ИТФ РАН	bel@landau.ac.ru	
Бескровный Анатолий Иванович	ОИЯИ	beskr@nf.jinr.ru	
Благов Александр Евгеньевич	ИК РАН	duuh@mail.ru	59
Благовещенский Николай Милюевич	ГНЦ РФ-ФЭИ	blag@ippe.ru	30
Блантер Михаил Соломонович	МГУПИ	mike.blanter@gmail.com	
Бобриков Иван Анатолеевич	ОИЯИ	bobrikov@nf.jinr.ru	68, 114
Бобровский Владимир Иванович	ИФМ УрО РАН	bobrovskii@imp.uran.ru	115
Бойко Михаил Евгеньевич	ФТИ РАН	m.e.boiko@mail.ioffe.ru	
Бойкова Анастасия Сергеевна	ИК РАН	pitbull1902@mail.ru	
Бойцова Ольга	МГУ	boytsova@gmail.com	116
Бокучава Гизо Дазмирович	ОИЯИ	gizo@nf.jinr.ru	69
Борисова Полина Алексеевна	НИЦ КИ	borisovapa@mail.ru	76
Борщевский Валентин	МФТИ	borshchevskiy@gmail.com	
Брагинец Юлия Петровна	ПИЯФ НИЦ КИ	aiver@inbox.ru	117
Быков Алексей Анатолеевич	СПбГУ	redi87@bk.ru	
Быков Эдуард Олегович	СПбГУ	mcgector@yandex.ru	
Валиев Эдуард	ИФМ УрО РАН	valiev@imp.uran.ru	118
Васин Роман Николаевич	ОИЯИ	olddragon@mail.ru	83

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Величко Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgen.velichko@lns.pnpi.spb.ru	105
Волков Владимир Владимирович	ИК РАН	vvo@ns.crys.ras.ru	58
Волчков Иван Сергеевич	ИК РАН	ivan-v1992@bk.ru	184
Воробьев Алексей Александрович	Университет Уппсала	avorobiev@ill.fr	73
Воронин Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	vvv@pnpi.spb.ru	46
Воронин Владимир Иванович	ИФМ УрО РАН	voronin@imp.uran.ru	119, 120, 121
Валков Стефан	ОИЯИ	stvalkov@nf.jinr.ru	122
Гайсин Айдар Уралович	СПбГУ	darikgais@gmail.com	
Гартвик Андрей Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gartwik@lns.pnpi.spb.ru	
Гладкая Анна	ПИЯФ НИЦ КИ	anna.v.gladkaya@gmail.com	185
Глазков Виктор Павлович	НИЦ КИ	vivadin@yandex.ru	123
Гогин Андрей Александрович	НИЦ КИ	gogin@physics.msu.ru	
Гольденберг Борис Григорьевич	ИЯФ СО РАН	goldenberg@inp.nsk.su	57
Горковенко Екатерина Артемовна	ОИЯИ	nireta2009@yandex.ru	186
Горшкова Юлия	ОИЯИ	gorshk@nf.jinr.ru	187
Гощицкий Борис Николаевич	ИФМ УрО РАН	bng@imp.uran.ru	
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	29
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Гуреев Александр Иванович	НИЦ КИ	gureevai2012@yandex.ru	
Гурьянов Александр Михайлович	СГАСУ	gurjanovam@mail.ru	188
Данилкин Сергей Андреевич	ANSTO	sdz@ansto.gov.au	124
Дарьин Андрей Викторович	ИГМ СО РАН	darin@ngs.ru	190
Дарьин Федор Андреевич	ИЯФ СО РАН	fad1k@yandex.ru	189
Дежин Виктор Владимирович	ВГУ	viktor.dezhin@mail.ru	125
Джепаров Фридрих Саламонович	НИЦ КИ	dzheparov@itep.ru	48
Дмитриев Владимир Петрович	SNBL@ESRF	dmitriev@esrf.fr	7
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	12
Дмитричева Елена Вячеславовна	ИК РАН	msdmitricheva@yandex.ru	90
Долганов Павел Владимирович	ИФТТ РАН	pauldol@issp.ac.ru	34
Домашевская Эвелина Павловна	ВГУ	ftt@phys.vsu.ru	191
Доморощина Елена Николаевна	МИТХТ	elena7820@gmail.com	192
Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	32167i@mail.ru	92
Дубовский Игнат Максимович	СПбГТИ(ТУ)	qwor50@gmail.com	193
Дубовский Олег Андреевич	ГНЦ РФ-ФЭИ	dubov@ippe.ru	126
Дудник Майя	ПИЯФ НИЦ КИ	mayyag.dudnik@gmail.com	127
Дунаевский Сергей Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	smd2000@mail.ru	128
Дышеков Артур Альбекович	КБГУ	dyshekov@yandex.ru	162

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Дьякова Юлия Алексеевна	ИК РАН	juliaadi@gmail.com	
Егоров Владимир Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	toizeg@gmail.com	80, 194
Ездакова Ксения	ПИЯФ НИЦ КИ	voroninakv@lnspnpi.spb.ru	
Екснер Гинка Калчева	ОИЯИ	exner_ginka@yahoo.com	
Елютин Николай Олегович	НИЯУ МИФИ	noelyutin@yandex.ru	129
Ефимов Виктор Борисович	ИФТТ РАН	efimov@issp.ac.ru	
Жакетов Владимир Дмитриевич	ОИЯИ	dadamax8@gmail.com	130
Захаров Аркадий Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	arcady@pnpi.spb.ru	
Злоказов Виктор Борисович	ОИЯИ	zlokazov@jinr.ru	131
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	zobkalo@pnpi.spb.ru	13
Зыкова Марина Павловна	ИК РАН	zykova_mp@inbox.ru	184
Иванкина Татьяна Ивановна	ОИЯИ	iti@nf.jinr.ru	239
Иванов Александр	ILL	aivanov@ill.fr	14
Иванов Дмитрий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	d.ivanov@phys.spbu.ru	
Иваньшина Ольга Юрьевна	ОИЯИ	ioyu@nf.jinr.ru	
Ильин Дмитрий Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	digatchi@list.ru	
Ильина Ксения Борисовна	ИК РАН	xenium-xyz@mail.ru	
Иоффе Александр Исаакович	JCNS@MLZ	a.ioffe@fz-juelich.de	5
Исаев-Иванов Владимир Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	isaev@omrb.pnpi.spb.ru	36

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Исмиева Севиндж Али	НАН Азербайджана	Sevinc_Ismiyeva@mail.ru	
Кадочников Владимир Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	vlkadochnikov@gmail.com	195
Кашурникова Ольга Владимировна	НИЯУ МИФИ	okash@mail.ru	196
Кириченко Валерий Григорьевич	ХНУ	val_kir48@mail.ru	132, 133
Кириченко Иван Сергеевич	ИГМ СО РАН	iskirichenko@igm.nsc.ru	197
Киселев Михаил Алексеевич	ОИЯИ	kiselev@jinr.ru	71
Кичанов Сергей Евгеньевич	ОИЯИ	ekich@nf.jinr.ru	11
Киямов Айрат Газинурович	К(П)ФУ Институт физики	airatphd@gmail.com	198
Клементьев Евгений Станиславович	ИЯИ РАН	clement@inr.ru	27, 51
Ковалев Анатолий Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kovalev@pnpi.spb.ru	134
Коваленко Екатерина Сергеевна	НИЦ КИ	kovalenko_es@mail.ru	75
Кодесс Борис Николаевич	ВНИИМС	kodess@mail.ru	135
Кожевников Сергей Васильевич	ОИЯИ	kozhevn@nf.jinr.ru	44
Козленко Денис Петрович	ОИЯИ	denk@nf.jinr.ru	6
Козлов Валерий Степанович	ПИЯФ НИЦ КИ	vskozlov@pnpi.spb.ru	
Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	100
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@lns.pnpi.spb.ru	32, 199, 200
Корусенко Петр Михайлович	ОНЦ СО РАН	korusenko@obisp.oscsbras.ru	201

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Коюда Дмитрий Анатольевич	ВГУ	koyuda@phys.vsu.ru	202
Кравцов Евгений Алексеевич	ИФМ УрО РАН	kravtsov@imp.uran.ru	41
Кравцова Антонина Николаевна	ЮФУ	akravtsova@sfedu.ru	203
Кузнецов Игорь Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ikuz@pnpi.spb.ru	47
Куклин Александр Иванович	ОИЯИ	kuklin@nf.jinr.ru	
Кульвелис Юрий Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	kulvelis@pnpi.spb.ru	77
Кунцевич Андрей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kuncevich_andrei@mail.ru	136
Курбаков Александр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	kurbakov@pnpi.spb.ru	9, 50
Кучугура Мария Дмитриевна	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	mariya_kuchugura@mail.ru	137
Лазаренко Владимир Александрович	НИЦ КИ	vladimir.a.lazarenko@gmail.com	204
Ласица Михаил Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	mishlas@yandex.ru	138
Лебедев Василий Тимофеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	vlebedev@pnpi.spb.ru	205
Лебедев Виктор Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	lebedev@pnpi.spb.ru	206
Лебедев Дмитрий Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dtry@omrb.pnpi.spb.ru	37
Леонтьев Игорь Николаевич	ЮФУ	i.leontiev@rambler.ru	67
Литвин Василий Сергеевич	ИЯИ РАН	vlitvin@inr.ru	102
Лихолетова Елена Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	likholetova@lns.pnpi.spb.ru	
Лозинская Анастасия Дмитриевна	ТГУ	lozinskaya_anastasia@rambler.ru	207
Лукин Евгений Валерьевич	ОИЯИ	Lukin@jinr.ru	101

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Львов Дмитрий Владимирович	ИТЭФ НИЦ КИ	lvov@itep.ru	62
Любомирский Михаил	ESRF	lyubomir@esrf.fr	139
Любутин Игорь Савельевич	ИК РАН	lyubutinig@mail.ru	21
Лямкин Виталий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	lyamkin@tpu.ru	140
Макарова Ирина Павловна	ИК РАН	makarova@crys.ras.ru	22
Максимов Вениамин Игоревич	ИФМ УрО РАН	kokailo@rambler.ru	10
Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	maleyevsv@mail.ru	
Марченков Никита Владимирович	ИК РАН	1414-88@mail.ru	141
Марченкова Маргарита Александровна	ИК РАН	margaritkaepf@gmail.com	81
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	93
Меньшикова Светлана Геннадьевна	ФТИ УрО РАН	svetlmensh@mail.ru	
Милов Игорь Дмитриевич	ПИЯФ НИЦ КИ	milov.igor.6990@gmail.com	185
Мирмельштейн Алексей Владиславович	РФЯЦ-ВНИИТФ	mirmelstein@mail.ru	26
Мирон Николай Фёдорович	НИЦ КИ	mironnf@gmail.com	
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	
Митропольский Иван Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	mitrplsk@pnpi.spb.ru	
Митюхляев Виктор Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	vicmit@pnpi.spb.ru	54
Молоденский Дмитрий Сергеевич	НИЦ КИ	d.s.molodenskiy@yandex.ru	103

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Молодцов Сергей Львович	European XFEL	serguei.molodtsov@xfel.eu	8
Москвин Евгений	ПИЯФ НИЦ КИ	mosqueen@pnpi.spb.ru	53
Мостовщиков Андрей Владимирович	ТПУ	pasembellum@mail.ru	97
Музыко Оксана Игоревна	ПИЯФ НИЦ КИ	muzyko@lns.pnpi.spb.ru	
Мурзин Вадим Юрьевич	НИЦ КИ	vadim.murzin@gmail.com	208
Незванов Александр Юрьевич	МГИУ	alexnezv@gmail.com	209
Неов Димитър Стойков	ОИЯИ	dneov@nf.jinr.ru	
Несов Сергей Николаевич	ОНЦ СО РАН	nesov55@mail.ru	210
Никитенко Юрий Васильевич	ОИЯИ	nikiten@nf.jinr.ru	142
Новиков Аркадий Георгиевич	ГНЦ РФ - ФЭИ	novikov@ippe.ru	
Новоселова Елена Григорьевна	НИУ ВШЭ	enovoselova@hse.ru	211
Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyaniakov_a_k@mail.ru	
Овчинникова Елена Николаевна	МГУ	ovtchin@gmail.com	143
Окороков Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov@pnpi.spb.ru	144
Ордон Магдалена Катажина	ОИЯИ	meg1988@op.pl	145
Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv@samsu.ru	
Павлов Константин	ПИЯФ НИЦ КИ	orbita.pk@lns.pnpi.spb.ru	212
Панкин Илья Андреевич	ЮФУ, МИЦ "Интеллектуальные материалы"	ilya-loko399@yandex.ru	146

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Пархоменко Виталий Данилович	ИФМ УрО РАН	parkhomenko@imp.uran.ru	147
Паршин Петр Петрович	НИЦ КИ	Parshin_PP@nrcki.ru	16
Петерс Георгий Сергеевич	НИЦ КИ	georgspeters@gmail.com	213
Пирогов Александр Николаевич	ИФМ УрО РАН	pirogov@imp.uran.ru	28
Пирожков Александр Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	pirozhkov@pnpi.spb.ru	49
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pnk@pnpi.spb.ru	52
Покоев Александр Владимирович	СамГУ	pokoev@samsu.ru	148
Попов Александр Николаевич	ESRF	apopov@esrf.fr	35
Попова Светлана Владимировна	ФГУП "ВИАМ"	popova-viam@mail.ru	
Поташев Станислав Ильич	ИЯИ РАН	potashev@inr.ru	
Просеков Павел Андреевич	ИК РАН	p.prosekov@gmail.com	
Раевска Альдона	ОИЯИ	aldonar@jinr.ru	214
Ремпель Андрей Андреевич	ИХТТ УрО РАН	rempel@ihim.uran.ru	
Робук Виктор Николаевич	ОИЯИ	robuk@jinr.ru	
Рогалев Андрей Леонидович	ESRF	rogalev@esrf.fr	19
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov@pnpi.spb.ru	149
Руткаускас Антон Владимирович	ОИЯИ	ranton@nf.jinr.ru	88
Рябухина Марина Викторовна	ИФМ УрО РАН	ryabukhina@imp.uran.ru	96
Савельев Сергей Константинович	БФУ	ssavxray@yandex.ru	215

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Савенко Борис Николаевич	ОИЯИ	savenko@nf.jinr.ru	216
Савостин Вадим Валентинович	ГНЦ РФ - ФЭИ	sav@ippe.ru	
Садыков Равиль Асхатович	ИЯИ РАН	rsadykov@inr.ru	
Саламатин Денис	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	87
Самойленко Сергей Александрович	ОИЯИ	samoilenko_pp@mail.ru	217
Самыгина Валерия Ролановна	ИК РАН	lera@ns.crys.ras.ru	39
Сарапин Глеб Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	sarapin.gleb@gmail.com	89
Светогоров Роман	НИЦ КИ	rdsvetov@gmail.com	150
Семенов Владислав Александрович	ГНЦ РФ-ФЭИ	semenov@ippe.ru	
Семушкина Галина Игоревна	ИНХ СО РАН	spectroscopy@mail.ru	106
Сенишин Анатолий Теодорович	Heinz Maier- Leibnitz Zentrum, TUM	anatoliy.senyshyn@frm2.tum.de	70
Сергеев Илья Анатольевич	DESY	ilya.sergeev@desy.de	56
Серебров Анатолий Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	serebrov@pnpi.spb.ru	61
Сжогина Алина Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	allin_ok2@mail.ru	218
Сивков Виктор Николаевич	КНЦ УрО РАН	svn@dm.komisc.ru	219
Смирнов Игорь Сергеевич	НИУ ВШЭ	ismirnov@hse.ru	151
Смирнов Олег Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	osmirnov@pnpi.spb.ru	
Смирнова Екатерина Сергеевна	ИК РАН	katen712@gmail.com	152
Смыслов Руслан Юрьевич	ИВС РАН	urs1968@gmail.com	220

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Соболева Анастасия Сергеевна	СПбГТИ(ТУ)	ansobol92@gmail.com	193
Созонтов Евгений Аркадьевич	НИЦ КИ	esozontov@yahoo.com	24
Соловей Валерий Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	solovei@pnpi.spb.ru	153
Соменков Виктор Александрович	НИЦ КИ	vsomenkov@yandex.ru	221
Сорокина Наталия Ивановна	ИК РАН	nsor@ns.crys.ras.ru	222
Сороколетов Дмитрий Сергеевич	ИЯФ СО РАН	nightspirit2010@yandex.ru	223
Спирин Дмитрий Евгеньевич	ВГУ	spirin@phys.vsu.ru	224
Срабионян Василий Валерьевич	ЮФУ	vvsrab@sfnedu.ru	225
Старосельский Иван Андреевич	НИЦ КИ	Staroselskij@physics.msu.ru	
Столяров Андрей Андреевич	ИЯИ РАН	AStolyarov@inr.ru	
Сударев Валерий	ГНЦ РФ-ФЭИ	valera.sudarev@ya.ru	
Сумников Сергей Викторович	ОИЯИ	sumnikovsv@gmail.com	
Сухарина Галина Борисовна	ЮФУ	galina_sukharina@mail.ru	154
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	svg@pnpi.spb.ru	45, 155
Сырых Геннадий Федорович	НИЦ КИ	dyproso2011@mail.ru	156
Таргонский Антон Вадимович	ИК РАН	targonsky@crys.ras.ru	157
Тарнавич Владислав	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	94
Теплых Александр Еренеевич	ИФМ УрО РАН	teplykh@imp.uran.ru	
Терехов Владимир Андреевич	ВГУ	terekhov@phys.vsu.ru	

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Терещенко Елена Юрьевна	ИК РАН	helena.tereschenko@gmail.com	227
Тимаева Олеся Иршатовна	МИТХТ	gertrudejames@mail.ru	
Ткаль Валерий Алексеевич	СПбГЭУ (филиал)	Valery.Tkal@yandex.ru	228
Толочко Борис Петрович	ИХТТМ СО РАН	b.p.tolochko@inp.nsk.su	
Топерверг Борис Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	Boris.Toperverg@RUB.de	42
Трояновская Полина Ивановна	ИФ НАНУ	kutpolina@gmail.com	78
Трояновский Дмитрий Анатольевич	ИМ НАНУ	trojanovskij@mail.ru	158
Трубина Светлана Владимировна	ИНХ СО РАН	svt@niic.nsc.ru	229
Турищев Сергей Юрьевич	ВГУ	tsu@phys.vsu.ru	230
Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	vitalja-turchenko@rambler.ru	159
Тюлюсов Антон Николаевич	ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	231
Уклеев Виктор	ПИЯФ НИЦ КИ	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	95
Ульянов Владимир Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ulyanov@pnpi.spb.ru	
Утесов Олег Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	utiosov@gmail.com	91
Федоров Владимир Викторович	ФТИ РАН	vfedorov@fl.ioffe.ru	160
Филиппов Сергей	IMC AS CR	filippov@imc.cas.cz	72
Фомин Алексей Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	fomin@pnpi.spb.ru	65
Хадиев Азат Равилевич	КАИ	azat.khadiev@mail.ru	161
Хаишбашев Геворг Арменакович	ЮФУ	gevorik17@ya.ru	82

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Хапачев Юрий Пшиканович	КБГУ	khapachev@yandex.ru	162
Хрыкина Ольга Николаевна	ИК РАН	kvarkpower@gmail.com	163
Хутану Владимир	JCNS@MLZ	Vladimir.Hutanu@frm2.tum.de	64
Цвященко Анатолий Васильевич	ИФВД РАН	tsvyash@hppi.troitsk.ru	164
Черемных Таисия Александровна	СПбГУ	taisdemetr@yandex.ru	
Черепанова Любовь Александровна	ИМЕТ УрО РАН	freely88@mail.ru	165
Черненко Юрий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	yucher@pnpi.spb.ru	
Черников Александр Николаевич	ОИЯИ	chern@nf.jinr.ru	166
Чернышев Юрий Сергеевич	СПбГУ	cherni@nmr.phys.spbu.ru	
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	55
Четвериков Юрий Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	yurka@lns.pnpi.spb.ru	167
Чижиков Вячеслав Анатольевич	ИК РАН	chizhikov@ns.crys.ras.ru	168
Чканов Андрей Евгеньевич	КАИ	chkanov_andrey@mail.ru	169
Чубова Надежда	ПИЯФ НИЦ КИ	chubova@lns.pnpi.spb.ru	84
Чуvenкова Ольга Александровна	ВГУ	chuvenkova@phys.vsu.ru	232
Чумаков Андрей	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakov@lns.pnpi.spb.ru	
Чумакова Александра Владимировна	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakova@lns.pnpi.spb.ru	
Чураков Андрей Владимирович	ОИЯИ	churakov@nf.jinr.ru	170
Шагинян Василий Робертович	ПИЯФ НИЦ КИ	vrshag@thd.pnpi.spb.ru	171

ФИО	Организация	e-mail	стр.
Шамаев Михаил Сергеевич	ГНЦ РФ-ФЭИ	mrshamaev@gmail.com	
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ РАН	mischar@mail.ru	233
Швецов Алексей Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	alexxy@omrb.pnpi.spb.ru	234
Шеверев Станислав	ОИЯИ	fontorque@mail.ru	99
Шилин Василий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	shilin@pnpi.spb.ru	235
Шишкин Иван Сергеевич	СПбГУ	shishkin-ivan@list.ru	236
Шмидт Александр Евгеньевич	ПИЯФ НИЦ КИ	schmidt@omrb.pnpi.spb.ru	237
Шушунов Михаил Николаевич	НИЦ КИ	viggenin@yandex.ru	
Эм Вячеслав Терентьевич	НИЦ КИ	vtem9@mail.ru	63
Эренбург Симон Борисович	ИНХ СО РАН	simon@niic.nsc.ru	23, 238
Юнг Игорь Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	igor.yung@rambler.ru	79
Юшанхай Виктор Юлиевич	ОИЯИ	yushankh@theor.jinr.ru	18
Якунина Елена Михайловна	ИФМ УрО РАН	eyakuninaart@gmail.com	98
Яшина Екатерина Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	yashina_91@inbox.ru	104