

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

Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния

ФКС-2017
11–16 марта 2017 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»

**LI Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

ФКС-2017
11–16 марта 2017 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников LI Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2017), 11–16 марта 2017 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the LI PNPI School on condensed state physics (CSP-2017). (11–16 of March, 2017, Saint Petersburg.)

Проведению Школы оказали поддержку:

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

Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 17-32-10055.

Сборник подготовили А. И. Окорочков, Н. Н. Губанова, Н. М. Чубова, Е. С. Лихолетова

Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.

© ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт», 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции	4
Стендовые доклады	
Секция «Нейтронное рассеяние»	25
Секция «Рассеяние синхротронного излучения»	54
Секция «Материалы и минералы»	94
Секция «Биофизика и наука о жизни»	161
Секция «Теория физики твердого тела»	175
Секция «Методика моделирования и приборы»	225
Список участников	248

Молекулярные машины (Нобелевская премия по химии за 2016 год)

В. А. Аветисов

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

Нобелевская премия по химии за 2016 год, как известно, была присуждена Жан-Пьер Соважу (Jean-Pierre Sauvage, University of Strasbourg, France), Фрейзеру Стоддарту (J. Fraser Stoddart, Northwestern University, Evanston, USA.) и Бернарду Ферингу (Bernard L. Feringa, University of Groningen, the Netherlands) «за дизайн и синтез молекулярных машин». Комитет пояснил, что молекулярная машина есть “*an assembly of a distinct number of molecular components that are designed to perform machinelike movements (output) as a result of an appropriate external stimulation (input)*”.

Конечно, катенаны (catenane) Соважа, ротаксаны (rotaxane) Стоддарта и молекулярный ротор (molecular rotor) Феринги – это впечатляющие примеры молекулярного изобретательства. Но большая часть научного сообщества, как мне показалось, сходилось на том, что о молекулярном машиностроении пока говорить явно рано. Впрочем, это понимал и сам Нобелевский комитет, заметив, что «молекулярный мотор находится на той же стадии развития, на каком электрический мотор был в 1830 году, когда ученые демонстрировали различные вращающиеся рукоятки и колеса, не подозревая, что они могли бы привести к стиральным машинам, вентиляторам и кухонным комбайнам». Выделяя работы Соважа, Стоддарта и Феринги, Нобелевский комитет, по-видимому, посчитал важным уже сейчас подчеркнуть историческую перспективу этого направления.

Но вернемся к фразе *machinelike movements* (машино-подобное движение) в пояснении выше, что есть молекулярная машина. Эта фраза определяющая, а смысл ее для молекулярных структур размером, скажем, в 20 ангстрем, весьма неопределенный. В этой связи, мне представляется интересным поговорить о том, каким физическим смыслом можно было бы наделить понятие «молекулярная машина» и с какими физическими проблемами может быть сопряжено их конструирование.

Современные подходы к разработке лекарственных препаратов широкого спектра действия для вновь возникающих вирусных инфекций

А. В. Васин

Научно-исследовательский институт гриппа, Санкт-Петербург, Россия

Несмотря на то, что известны сотни вирусов, вызывающих заболевания у человека, число применяемых в настоящее время противовирусных препаратов едва превышает десяток. При этом большинство из них являются неэффективными для вновь возникающих вирусных инфекций (SARS, MERS, лихорадки Эбола, Денге, Зика и другие). Для решения данной проблемы необходимы препараты широкого спектра действия, концепция которых впервые была представлена в 1970-х годах с открытием рибавирина, ингибирующего синтез вирусных РНК или ДНК. В доклинических исследованиях рибавирин показал эффективность в отношении многих вирусных инфекций, однако в клинических исследованиях его эффект был невелик. Другой группой препаратов широкого спектра действия являются интерфероны, проявляющие активность в отношении большинства известных вирусов позвоночных, но и в этом случае клинические результаты их применения не всегда успешны. В целом, по причине существенного разнообразия последовательностей и структур вирусных белков дизайн препаратов направленного спектра действия широкого применения редко выполним. К настоящему времени только для одного класса молекул, ингибиторов нуклеозидов, показана эффективность в клинике. Так, недавно были разработаны многообещающие аналоги нуклеотидов и нуклеозидов нового поколения (BCX4430, T-705 и CMX001), ингибирующие репликацию более 20 РНК-содержащих вирусов 9 семейств. Альтернативной стратегией разработки противовирусных препаратов широкого спектра действия является использование в качестве мишеней клеточных белков, задействованных в жизненном цикле многих вирусов. Помимо универсальности такие препараты обладают высоким генетическим барьером к возникновению устойчивости. Наиболее клинически продвинутыми представителями данного класса соединений являются, например, ингибиторы циклофилина А и ингибиторы протеиндисульфидизомераз, нарушающие фолдинг вирусных белков, а также ингибиторы клеточных киназ GAK и AAK1, регулирующих вирусный траффик в клетке. Безусловно, такой подход также имеет целый ряд проблем, в первую очередь, связанных с тем, что клеточные белки функционируют в сложной сети взаимодействий, и полное понимание механизма действия препарата очень часто является иллюзорным. Другой важной проблемой является токсичность, однако существует возможность подобрать терапевтическое окно, когда концентрация препарата вызывает минимальную клеточную токсичность, но при этом достаточна для ингибирования вирусной репликации. В отличие от длительной терапии продолжительность курса для острых инфекций гораздо меньше, что также позволяет минимизировать токсические эффекты. Подводя итоги, можно сказать, что для вновь возникающих вирусных инфекций успешное лечение может быть достигнуто комбинацией новых препаратов широкого спектра действия, направленного как на вирусные, так и клеточные мишени.

Исследование сегнетоэлектриков на больших установках

С. Б. Вахрушев

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

После своего открытия, сегнетоэлектрики и пьезоэлектрики (исторический очерк см в книге [1]) привлекли к себе широкое внимание. Говоря о привлечении нейтронного рассеяния к изучению сегнетоэлектриков следует выделить 2 важных момента: (1) в микроскопическом механизме сегнетоэлектрических фазовых переходов важную роль, как правило, играет взаимное смещение легких и тяжелых атомов, что определяет эффективность нейтронного рассеяния для исследования их структуры; и (2) – неупругое рассеяние нейтронов явилось практически единственным методом эффективного изучения критической динамики (в последние 15 лет большую роль в этом вопросе стала играть техника неупругого рассеяния рентгеновского (синхротронного) излучения). Уже в 1974 году был опубликован первый обзор по применению нейтронного рассеяния для изучения структурных, главным образом сегнетоэлектрических, фазовых переходов [2], а в книге [3] приведен подробный анализ рассеяния нейтронов в сегнетоэлектриках. В последние годы все большее внимание привлекают разупорядоченные системы. Крайне важным в этом случае оказывается изучение диффузного рассеяния на монокристаллах, однако, их маленький объем, что ограничивает применение нейтронной техники и резко повышает роль рассеяния синхротронного излучения.

В представляемом докладе я остановлюсь на следующих вопросах:

1. сегнетоэлектрики, антисегнетоэлектрики, пьезоэлектрики, релаксоры;
2. структурные фазовые переходы, средняя и локальная структура пара- и низкосимметричных фаз, морфотропная фазовая граница;
3. мягкие моды и неупругое рассеяние нейтронов, неупругое рассеяние СИ;
4. диффузное рассеяние;
5. заключение и перспективы.

1. W. Heywang, K. Lubitz, W Wersing «Piezoelectricity» Springer Series in Materials Science, v. 114 (2008).
2. G. Shirane, Rev. Mod. Phys. 46, 437 (1974).
3. В.Л. Аксенов, Н.М. Плакида, С. Стаменкович. «Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками», М: Энергоатомиздат, 1984.

Scientific studies of consciousness: yesterday, today, and tomorrow

B.M. Velichkovsky

National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

Though consciousness is central to human life, it has been little studied by natural science methods. It was an important part of psychological inquiry in the 19th century, but languished for most of the 20th century with the insistence on quantitative methods and replicability. For example, in the United States, the behaviorist movement – being impressed by antimentalism of the Pavlov’s school – explicitly rejected study of internal states, stressing the role of learning based on stimulus to response contingencies. In the 21st century, new methods in both neurophysiology and cognitive psychology arisen from the NBIC-revolution have reopened the study of consciousness, relating it to essential functions of human cognition. As consciousness is universal to all people, like eyes or hearts, the brain machinery that supports it must rely on genes that are selected for. If the still-unknown array of genes supporting consciousness is maintained, there must be some essential capabilities that consciousness bestows. Otherwise, a genetically supported trait that is not useful would disappear. General evolutionary considerations do not tell us what those capabilities are, however. I will therefore address several lines of in-depth experimental studies of consciousness and voluntary action followed at the Kurchatov complex of NBICS-technologies. As a prerequisite for such studies, we recently developed a system for non-invasive multimodal registration of brain activity with the help of hardware peripherals, compatible with strong magnetic fields (Kurchatov prize, 2015) overcoming main faults of the functional magnetic resonance imaging (fMRI), namely, its low temporal resolution and the correlational nature of registered data. For the first time, we have described causal connections of neural networks, implementing the state of wakeful rest – the basic state for human consciousness, with a pronounced asymmetry of causal connections of left and right hippocampi within so-called Default Mode Network (DMN – see Ushakov et al., 2016). Systematic interhemispheric differences, even in the case of adjacent brain regions, for example, frontopolar regions BA10L and BA10R, were discovered during the research of genes differential expression in the human cerebral cortex. In this regard, new protein-coding genes prevailed in BA10R (Nedoluzhko et al., 2016). Furthermore, it was discovered, that some of the specific human genes of frontopolar cortex have the relation not to neurons, but to glial cells (Elfimova et al., under review), that may explain a relatively low efficiency of neural network models of cognitive processes. In a more applied line of studies, we have for the first time identified objective markers of intention to execute a voluntary action in EEG/MEG-data (Shishkin et al., 2016). This made it possible to improve the performance of brain-computer and eye-brain-computer interfaces. All these results open the way for a fast progress in interdisciplinary conscious research explaining phenomenological observations and building basis for new and emerging cognitive technologies.

Малоугловое рассеяние и структура биологических макромолекул

В. В. Волков

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов (МУР) применяют для изучения морфологии макромолекул белков и их комплексов, которые могут находиться в условиях, приближенных к естественным – в растворе. В последнее время значительный прогресс методов криоэлектронной микроскопии и ядерного магнитного резонанса создал уникальные возможности комплексного изучения строения биомолекул. Комплексный подход в данном направлении особенно важен, так как обратные задачи восстановления структурных параметров частиц в неупорядоченных системах отличаются исключительно плохой обусловленностью, что приводит к численно нестабильным решениям. Кроме того, такая задача, как определение формы макромолекулы по данным рассеяния математически неоднозначна. Неоднозначность, тем не менее, в случае малоуглового рассеяния ограничена, так как все находимые по данным МУР модели частиц должны иметь одинаковые наборы структурных инвариантов. Наиболее устойчиво определяемые из экспериментальных данных инварианты – радиус инерции и максимальный диаметр – можно в типичных случаях находить с точностью порядка нескольких процентов. В докладе рассматриваются различные методы нахождения инвариантов и структурных моделей, обсуждаются особенности численной реализации соответствующих компьютерных программ, даются практические рекомендации по их применению на примере решения реальных задач. Рассмотренные методы охватывают как простейшие случаи изучения монодисперсных систем, так и более сложные проблемы исследования многокомпонентных смесей макромолекул. Особое внимание в докладе уделено методам пробоподготовки, этапам анализа данных и, что наиболее важно, способам оценивания устойчивости решений и, следовательно, их надежности. Рассмотрены случаи возможной неверной интерпретации и приемы, повышающие достоверность ответа. Рассмотрение методов МУР ведется на примере программного пакета ATSAS [1] и книги [2].

1. M. V. Petoukhov et al., J. Appl. Cryst. 45, 342 (2012).

2. Д. И. Свиргун, Л. А. Фейгин. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние – М.: Наука. – 1986. – 280 с.

Многочастичная локализация

И. В. Горный

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany*

Многочастичная локализация представляет из себя концептуально важное явление локализации возбуждений в неупорядоченных системах с взаимодействием между частицами в отсутствие связи с «внешним миром». Первая часть лекции будет содержать исторический обзор развития теории многочастичной локализации и описание экспериментов, имеющих отношение к этому явлению. Вторая часть будет посвящена обсуждению недавно предложенных механизмов усиления многочастичной делокализации процессами спектральной диффузии и взаимодействия «горячих» и «холодных» электронов в континуальных системах.

Multiferroicity in spin ice: Bilayered crystal of magnetic monopoles in $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

A. Gukasov

Leon Brillouin Laboratory, Saclay, France

In geometrically frustrated pyrochlore magnets, the magnetic interactions cannot be simultaneously satisfied, leading to short-range magnetic orders called spin ices or spin liquids. Spin ice support an extensively degenerate ground state and ensure the local conservation of magnetic fluxes. Such flux conservation can be described as Coulomb spin liquid by analogy with Maxwell's electromagnetism where excitations take the form of emergent *magnetic monopole*. It was found that under a field spin liquid $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ orders as a three dimensional arrangement of *magnetic monopole* and *antimonopole* double layers [1]. Recent theory shows that magnetoelectric coupling in pyrochlores is able to lift the degeneracy and to manipulate topological excitations. As a result the electric dipolar interactions can be responsible for the emergence of the double-layer structure of *monopoles* [2].

1. A. Sazonov et al. Phys. Rev. B 85, 214420, 2012.
2. L. D. C. Jaubert and R. Moessner Phys. Rev B 91, 214422, 2015.

Резонансная дифракция синхротронного излучения как метод изучения структурных, электронных и магнитных свойств кристаллов

В. Е. Дмитриенко

*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия
Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Резонансная дифракция рентгеновского синхротронного излучения возникает, когда падающая на кристалл волна удовлетворяет условию дифракции Брэгга, а энергия фотонов настраивается на уровни поглощения атомов в кристалле. Дифракция обеспечивает чувствительность к положению атомов в элементарной ячейке, т. е. к атомной структуре. А резонансный характер взаимодействия с электронами кристалла делает этот метод чувствительным к электронным и магнитным свойствам. Так как края поглощения различных химических элементов существенно разнесены, этот метод оказывается ещё и элементочувствительным. Важной особенностью данного метода является использование поляризованного рентгеновского излучения для получения более детальной информации. В настоящее время резонансная дифракция широко применяется в исследованиях кристаллических материалов, что отражено в многочисленных обзорах [1–3]. В докладе будут представлены экспериментальные и теоретические основы резонансной дифракции и нетривиальные примеры её использования для исследования сложных магнетиков, мультиферроиков, жидких кристаллов и других материалов.

1. В.Е. Дмитриенко, Е.Н. Овчинникова. Кристаллография. 48. S59 (2003).
2. Е.Н. Овчинникова, Э.Х. Мухамеджанов. Кристаллография. 61. 735 (2016).
3. Lovesey S. W., Balcar E., Knight K., Fernandez-Rodriguez J. Phys. Rep. 411. 233. (2005).

Загадка магнитного компаса перелетных птиц

*К. В. Кавокин^{1, 2, 3}, Р. В. Чербунин^{2, 3}, А. Ф. Пахомов⁴, Л. А. Астахова³,
Н. С. Чернецов^{3, 4, 5}, Ю. Г. Бояринова^{3, 5}*

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

² *Лаборатория Оптики спина, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И. М. Сеченова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Биологическая станция «Рыбачий» Зоологического института РАН, Санкт-Петербург, Россия*

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

Существование системы ориентации по геомагнитному полю (магнитного компаса) у птиц считается в настоящее время надежно доказанным, однако физические механизмы компасной магниторецепции остаются невыясненными.

Наиболее популярна в настоящее время фотохимическая гипотеза устройства компасного магниторецептора птицы, рассматривающая в качестве активного элемента молекулу светочувствительного белка – криптохрома. При поглощении фотона видимого света криптохром образует пару радикалов, несущих магнитные моменты нескомпенсированных электронных спинов. Теория предсказывает чувствительность скоростей такого рода бирадикальных реакций не только к постоянным, но и к переменным магнитным полям на частотах, близких к частоте электронного спинового резонанса в геомагнитном поле (единицы мегагерц). В экспериментах, поставленных специально для проверки этой теории двумя ведущими группами во Франкфурте и Ольденбурге, действительно наблюдалась дезориентация птиц (зарянок и садовых славок) под действием радиочастотных магнитных полей, причем амплитуда переменного поля, вызывающего дезориентацию, была чрезвычайно малой (единицы нТл). Этот результат был подтвержден и нашими экспериментами [1] Такая чувствительность требует очень долгих (сотни миллисекунд) релаксационных времен электронных спинов, невозможных в органических молекулах при биологических температурах, и не может быть объяснена в рамках бирадикальной теории.

Это противоречие может быть разрешено в рамках гибридной модели, включающей фотохимический датчик и магнитную антенну из нанокристалла магнетита. Однако лимитирующим фактором являются собственные шумы такой антенны.

Для решения загадки магнитного компаса необходимы новые экспериментальные подходы, сочетающие физические и биологические методы.

1. Kavokin K. et al. Magnetic orientation of garden warblers (*Sylvia borin*) under 1.4 MHz radiofrequency magnetic field. *J. R. Soc. Interface*. 2014. 11: 20140451. doi: 10.1098/rsif.2014.0451; Pakhomov et al, *J. R. Soc. Interface*. 2017, to be published.

Классические и квантовые эффекты в динамике двухуровневых систем

М. Н. Киселев

The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy

На примере двух классических осцилляторов, связанных магнито-дипольным взаимодействием, периодически зависящим от времени, показано, что ряд эффектов, лежащих в основе квантового когерентного контроля в квантовой информатике (таких как, например, эффект Ландау-Зинера, осцилляции Раби, осцилляции Штукельберга и т. д.) имеют классические аналоги в динамике механических систем с несколькими степенями свободы. Рассмотренная аналогия, с одной стороны, позволяет продемонстрировать основные принципы квантового когерентного контроля, с другой стороны, подчеркивает фундаментальные отличия между квантовыми и классическими системами.

Взаимосвязь изменений структуры и свойств кристаллов-суперпротоников

И. П. Макарова

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Изучение особенностей атомного строения веществ с особыми физическими свойствами является важнейшей фундаментальной задачей для создания в дальнейшем материалов с прогнозируемыми характеристиками. Структурные исследования являются центральным звеном при установлении взаимосвязи между составом, структурой и свойствами кристаллических материалов. Взаимодополняющие рентгеновские, нейтронографические и электронно-микроскопические методы позволяют определить структуру кристаллов с высокой степенью надежности, выявить тонкие детали перестроек при фазовых переходах, изоморфных замещениях.

Характерной особенностью кристаллов-суперпротоников $M_mH_n(АO_4)_{(m+n)/2} \cdot xH_2O$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4$; $AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, HAsO_4$) являются фазовые переходы, сопровождающиеся появлением высокой протонной проводимости, что привлекает внимание к этому семейству с точки зрения изучения влияния водородной подсистемы на свойства, а также возможности создания материалов для различных электрохимических устройств. Полученные данные показывают разнообразие структурных механизмов изменений их свойств: формирование динамически разупорядоченной системы водородных связей [1], диффузия воды и образование каналов для движения ионов [2, 3], уменьшение числа H-связей, обусловленное замещением групп AO_4 [4], формирование многофазного состояния [5], образование дополнительных связей при замещении катионов [6].

Работа выполнена при финансовой поддержке по Программе фундаментальных исследований ОФН РАН «Физика новых материалов и структур».

1. И. П. Макарова // Физика твердого тела. 57(3), 432 (2015).
2. I. Makarova et.al. // Acta Cryst. B70, 218 (2014).
3. E. V. Dmitricheva et.al. // Solid State Ionics. 268, 68 (2014).
4. I. Makarova et.al. // Acta Cryst. B72, 133 (2016).
5. I. Makarova et.al. // Ferroelectrics. 500, 54 (2016).
6. E. В. Дмитричева и др. // Кристаллография. 60(6), 880 (2015).

Ядра – о главном: изучая структуру белков методом ядерного магнитного резонанса

К. С. Минеев

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

Одной из основных проблем современной науки является выявление взаимосвязи между структурной организацией белков и особенностями их функционирования. Существует несколько физических методов анализа пространственной структуры макромолекул, каждый из которых имеет свои преимущества и недостатки. В настоящий момент наиболее широко применяются три подхода – рентгеноструктурный анализ, криоэлектронная микроскопия и спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР). ЯМР-спектроскопия является наиболее мощным методом, с точки зрения количества получаемой информации. С использованием ЯМР можно не только определять трехмерные структуры в растворе, но и исследовать внутримолекулярную подвижность белков и нуклеиновых кислот, а также изучать термодинамику и кинетику различных процессов в широком диапазоне характерных времен: от пикосекунд до нескольких дней. С другой стороны, широкому распространению ЯМР-спектроскопии препятствует ряд технических трудностей и ограничений. Так, например, размер объекта исследования классической ЯМР-спектроскопии высокого разрешения ограничен 30–50 кДа, а использование многомерных гетероядерных методик ЯМР требует больших затрат времени на детекцию спектров, а также денег на продукцию изотопно-меченых препаратов белков. В последние годы был разработан ряд методик ЯМР-спектроскопии, позволяющих преодолевать перечисленные ограничения.

В рамках доклада будут описаны основные наиболее современные подходы ЯМР-спектроскопии в растворе, используемые для определения пространственных структур больших молекул, в том числе мембранных и неупорядоченных белков. Будут также коротко представлены методы изучения внутримолекулярной подвижности белков на основе измерения параметров ЯМР-релаксации различных ядер, описаны последние работы лаборатории в области исследования пространственной структуры ряда клеточных рецепторов.

О возможности использования сорбционных процессов ДНК на фрактальной поверхности с диагностической целью в медицине

*Б. Л. Оксенгендлер¹, А. Х. Аширметов²,
И. Кадилова², И. Нургалиев¹, Ж. Азимов¹*

¹ Научно-исследовательский центр химии и физики полимеров при Национальном университете Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

² Научно-исследовательский институт гематологии и переливания крови Министерства здравоохранения Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан

В ряде медико-биологических исследований выявлено, что по соотношению количества внеклеточной ДНК различной длины в плазме крови можно информативно судить о наличии и степени тяжести ряда патологических состояний в организме человека. В этой связи особую актуальность приобретает проблема сепарации фракций ДНК по размерам, поскольку используемые для этого методы в настоящее время довольно дорогостоящи [1]. Метод адсорбции для этой цели представляется более дешёвым и перспективным, но он связан с рядом трудностей в отношении подбора оптимальных адсорбентов для ДНК [2]. В связи с чем, нами был предложен метод физической сорбции фрагментов ДНК на фрактальной поверхности [3], содержащей спектр пор $N(R,D)$, причём фрактальная размерность D , такой поверхности и концентрация центров адсорбции могли быть отрегулированы специальными методами применительно к определённому типу адсорбентов. Алгоритм всего подхода сводится к следующему: предварительно определяется фрактальная размерность поверхности избранного адсорбента с помощью адсорбции на ней «тестовых» ДНК – трёх однонитевых олигонуклеотидов с известными длинами цепочек; для выявления в плазме крови совокупности фрагментов ДНК с неизвестным спектром длин цепочек $F(L)$ производится их адсорбция на этом адсорбенте и затем десорбция при постепенном увеличении температуры, вызывающей пиковые выбросы фрагментов ДНК, зависящих как от фрактального спектра пор $N(R,D)$, так и от $F(L)$. Последующая математическая обработка совокупности полученных пиков позволяет выявить спектр $F(L)$ для их сравнения с уже известными данными, полученными при различных патологических состояниях. Предлагаемый метод был испытан при ряде опухолей желудочно-кишечного тракта и различных видах лейкозов. Полученные результаты продемонстрировали быструю и дешёвую возможность выявления онкозаболеваний в ранней стадии их развития, а также контроля эффективности проводимого лечения.

1. F. Persson, J.O. Tegenfeldt. Chem. Soc. Rev., 2010, 39, 985-999.

2. H. Tian, A. Nuhmer and J. Landers. Anal. Biochem. 2000, 283, 175.

3. А. Х. Аширметов, Б.Л. Оксенгендлер, Ж.Т. Азимов и др. Биофизика, 2013, 58, 409-414.

Открытие аутофагии и расшифровка ее молекулярного механизма (Нобелевская премия по физиологии и медицине за 2016 год)

С. В. Саранцева

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В 2016 году Нобелевская премия в области биологии и медицине была присуждена Йошинори Осуми (Yoshinori Ohsumi) специалисту по биологии клетки из Технологического университета Токио за открытие механизма аутофагии. Аутофагия («самопоедание») эволюционно консервативный процесс, благодаря которому эукариотические клетки могут повторно использовать часть своего собственного содержания. В отличие от других клеточных деградиционных процессов, в результате аутофагии удаляются долгоживущие белки, большие макромолекулярные комплексы и органеллы, которые атрофированы или повреждены. Аутофагия – промежуточный процесс между перевариванием и повторным использованием «несущественных» частей клеток во время голода. Кроме того, она играет важную роль в инфекции, старении и патогенезе многих заболеваний человека. Хотя аутофагия была известна уже в шестидесятых годах прошлого века, механизм и физиологическая значимость процесса оставалась непонятой еще десятилетия. В 1993 году Осуми публикует данные об открытии 15 генов, являющихся ключевыми для процесса аутофагии в дрожжах. В серии оригинальных экспериментов он клонировал некоторые из них и выяснил функции кодируемых ими белков.

Пресс-релиз Нобелевского комитета гласит: «Открытия Осуми привели к новой парадигме в нашем понимании того, как клетки сами утилизируют свое содержимое. Его открытия проложили путь к пониманию фундаментальной важности аутофагии для множества физиологических процессов, таких как адаптация к голоду и ответ на инфекцию».

Топологические фазовые переходы и топологические фазы вещества (Нобелевская премия по физике за 2016 год)

А. О. Сорокин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В 2016 году Нобелевская премия по физике была присуждена ученым из Великобритании Джону М. Костерлицу, Дейvidу Дж. Таулессу и Ф. Данкану Холдейну «за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи». Премии были удостоены три серии работ, внесших существенный вклад в понимание роли топологических эффектов в физике конденсированного состояния. В этих работах на примере достаточно простых низкоразмерных систем продемонстрировано, что существуют состояния и свойства материи, которые не могут быть объяснены стандартными аргументами типа симметрии и механизмов ее нарушения, но которые объясняются именно с помощью топологии.

Первая серия работ [1, 2] посвящена изучению фазового перехода и низкотемпературных свойств классического двумерного XY ферромагнетика. Показано, что взаимодействие топологических дефектов (вихрей) индуцирует при ненулевой температуре фазовый переход особого рода, ниже которого наблюдается т. н. квазидальний порядок со степенным убыванием корреляционных функций. Во второй серии [3, 4] доказывается, что точное квантование эффекта Холла и отсутствие продольного сопротивления на краях двумерного полупроводника имеет топологическую природу, связанную с фазой Берри краевых состояний электронного газа. И наконец, в работах [5, 6] изучаются свойства спектра квантовой антиферромагнитной цепочки. Холдейн показал, что флуктуации характеризуются топологическим числом, и если спин имеет целое значение, то флуктуации с разными числами усиливают друг друга, и в спектре возникает щель, а в случае полуцелого спина такие флуктуации компенсируют друг друга, и щель не возникает.

Названные работы уже стали началом новых направлений в теоретической физике и в физике конденсированного состояния, а открытые эффекты уже были наблюдаемы экспериментально.

1. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 6, 1181 (1973).
2. J. M. Kosterlitz, J. Phys. C: Solid State Phys. 7, 1046 (1974).
3. D. J. Thouless et al., Phys. Rev. Lett. 49, 405 (1982).
4. D. J. Thouless, Phys. Rev. B 27, 6083 (1983).
5. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 50, 1153 (1983).
6. F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A 93, 464 (1983).

Фрактальная глобула с точки зрения малоуглового рассеяния нейтронов

*С. В. Григорьев^{1, 2}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, Е. В. Величко³, М. В. Филатов²,
Wim G. Bouwman³, Chris P. Duif³, A. Brulet⁴*

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Delft University of Technology, Netherlands

⁴ Laboratory Leon Brillouin, Saclay, France

На сегодняшний момент наиболее популярная модель, описывающая трехмерную конфигурацию упаковки хроматина в ядре клетки – модель складчатой или фрактальной глобулы. Складчатая глобула – это незамкнутая макромолекула с иерархически самоподобной укладкой полимерной цепи. В работах [1, 2] было показано, что укладка ДНК в хромосоме имеет структуру складчатой глобулы. Модель складчатой глобулы объясняет, каким образом достаточно длинный участок ДНК может обратимо и быстро складываться и распаковываться при считывании генетической информации. Эта модель предполагает, что хроматиновая фибрилла укладывается самоподобным образом напоминая известную в теории фракталов кривую Пеано [3], которая имеет размерность 3 и полностью заполняет трехмерное пространство.

Эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов на ядрах куриных эритроцитов демонстрируют, что крупномасштабная организация хроматина диктует следующий закон рассеяния

$$I(Q) = A(1+(Q\xi)^2)^{-3/2}, \quad (1)$$

где A – это константа, а ξ – размер ядра. Соответствующая корреляционная функция плотности вещества внутри ядра ($r/\xi < 1$) равна

$$\gamma(r) = \ln(r/\xi). \quad (2)$$

Физический смысл корреляционной функции – это вероятность найти ненулевую плотность на разных масштабах. Зная корреляционную функцию, можно найти объем частицы. Интегрируя $\gamma(r)$ по трехмерному пространству получаем

$$V(r) \sim r^3 \ln(r/\xi). \quad (3)$$

Объект, описывающийся такой мерой (объем-мера), называется логарифмическим фракталом. В более общем виде логарифмическая мера записывается следующим образом

$$\mu(r) = r^{D_f} \ln^\Delta(1/r), \quad (4)$$

где D_f – размерность Хаусдорфа-Безикевича, а Δ – подразмерность.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 17-02-00313 А.

1. L.A. Mirny, Chromosome Res. 19, 37 (2011).

2. E. Lieberman-Aiden, N. L. van Berkum, L. Williams et al., Science 326, 289 (2009).

3. Мешков Д.А., Аветисов В.А., Наноструктуры. математическая физика и моделирование, том 13, № 1, 5–98, (2015).

Аддитивный закон масштабирования структурной организации хроматина в ядрах куриных эритроцитов

*С. В. Григорьев^{1, 2}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, Е. В. Величко³, М. В. Филатов²,
Wim G. Bouwman³, Chris P. Duif³, A. Brulet⁴*

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

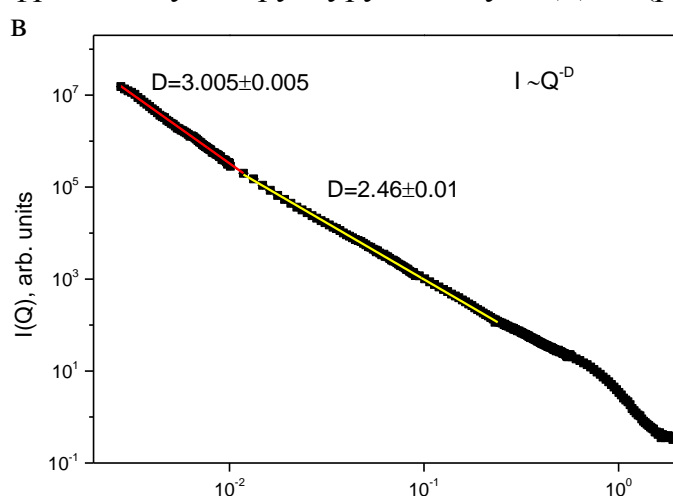
² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Delft University of Technology, Netherlands

⁴ Laboratory Leon Brillouin, Saclay, France

При всех впечатляющих успехах биологии и генетики в последние десятилетия, определение структурной организации хроматина в ядре в естественных условиях остается одним из главных нерешенных вопросов. Ясно, что именно структурная организация хроматина приводит в высшей степени его компактности. Кроме того, принципы транспорта напрямую связаны и определяются особенностями структурной укладки хроматина. Такая структура должна обеспечивать быстрый транспорт.

Эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов демонстрируют бифрактальную структуру молекулы ДНК (рис.) [1]. Показатель степенной функции



сечения малоуглового рассеяния нейтронов D равен 2.46 ± 0.01 на масштабах 30–600 нм, а на масштабах от 600 нм до 1500 мкм $D = 3,005 \pm 0.005$ [1]. В рамках фрактальной концепции $D = 2,46$ соответствует объемному (массовому) фракталу с фрактальной размерностью $D_m = 2,46$. Показатель степени, равный 3 соответствует очень специальному виду фрактальной организации вещества – логарифмическому фракталу. Что в свою очередь означает, что крупномасштабная организация хроматина имеет иерархически разветвленную структуру, похожую на трехмерное сферически симметричное дерево складок, что обеспечивает максимальную доступность любого участка

Рис. Малоугловое рассеяние нейтронов на ядрах куриных эритроцитов. Интенсивность рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $10^3 : 10^2 \text{ nm}^{-1}$ – ТРА LLB, Сакле, Франция. Интенсивность рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $10^2 : 10^0 \text{ nm}^{-1}$ – РА20 LLB, Сакле, Франция

из вне и максимально компактную, плотную структуру. По всей видимости, такая структура является характерической для живых систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 17-02-00313 А.

1. D.V. Lebedev, M.V. Filatov, A.I. Kuklin, A.Kh. Islamov, E. Kentzinger, R. Pantina, B.P. Toperverg, V.V. Isaev-Ivanov, FEBS Letters, 579, 1465–1468, (2005).

Запутанные квантовые состояния и квантовая телепортация

А. В. Майорова

*Центр перспективных исследований, Санкт-Петербургский политехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В 1935 году, в журнале *Physical Review* была опубликована статья [1], в которой А. Эйнштейн, Б. Подольский и Н. Розен поставили под сомнение полноту квантовой теории. Предложенная в их работе схема мысленного эксперимента по косвенному измерению параметров микрообъекта получила название ЭПР-парадокса. Суть данного парадокса заключается в следующем: если есть две частицы, имеющие общее происхождение, то можно, измерив состояние одной частицы, предсказать состояние другой, над которой измерение ещё не производилось. Такие частицы называют запутанными (*entangled*). Работа Эйнштейна-Подольского-Розена привела к появлению различных теорий скрытых параметров, наиболее известной из которых является теория де Бройля-Бома [2]. Спустя 30 лет, в 1964 году Дж.С. Белл [3] предложил способ проверки существования скрытых параметров с помощью некоторых неравенств, которые позже получили название «неравенства Белла». Экспериментальные проверки начались в 70-е годы прошлого века и продолжаются по сей день (см., например, [4–11]). Квантовая телепортация, основанная на запутанных квантовых состояниях, используется в квантовых вычислениях и квантовой криптографии, в метрологии, в банковском деле и современных военных технологиях (квантовый радар).

1. A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Phys. Rev.* 47, 777 (1935).
2. D. Bohm, *Quantum Theory*, Prentice-Hall, Englewoods Cliffs (1951). Republished by Dover (1989).
3. J. S. Bell, *Physics* (Long Island City, N.Y.) 1, 195 (1964).
4. S.J. Freedman and J.F. Clauser, *Phys. Rev. Lett.* 28, 938 (1972).
5. J.F. Clauser, *Phys. Rev. Lett.* 36, 1223 (1976).
6. E.S. Fry, and R.C. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* 37, 465 (1976).
7. A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* 47, 460 (1981).
8. A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* 49, 91 (1982).
9. A. Aspect and P. Grangier, *Lett. Nuovo Cimento* 43, 345 (1985).
10. Z.Y. Ou and L. Mandel, *Phys. Rev. Lett.* 61, 50 (1988).
11. G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* 81, 5039 (1998).

Киральность и топологические свойства магнитных текстур

К. Л. Метлов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, Донецк, Украина

Хорошо известно свойство магнитных материалов к формированию широкого спектра низколежащих метастабильных состояний, которые соответствуют различным распределениям намагниченности (магнитным текстурам) [1]. Следствием этого является макроскопический магнитный гистерезис, но возможно и более тонкое управление магнитными состояниями, ставшее наиболее актуальным с развитием нано-размерной литографии. Особенно интересны магнитные текстуры планарных магнитных наноэлементов (вырезанных из тонких плёнок островков различной формы), которые удобно описывать при помощи аналитических функций комплексного переменного [2, 3] как в статике [4], так и в динамике [5].

Комплексное описание открывает возможности для поиска физических реализаций различных нетривиальных (по крайней мере, с точки зрения магнетизма) топологических свойств аналитических функций комплексного переменного. Например, в многосвязных (содержащих отверстия) планарных наноэлементах [6] возникают дополнительные условия [7] на положения вихрей и анти-вихрей, которые являются следствием теоремы Абеля. Киральности магнитной текстуры соответствует знак описывающей её аналитической функции комплексного переменного (изменение знака меняет киральность на противоположную). Влияние киральности на динамику магнитных текстур [5], нарушение киральной симметрии, связанные с этим ошибки и заблуждения будут так же обсуждаться в настоящем докладе.

1. W.F. Brown, Jr., *Micromagnetics*, New York: Wiley (1963).
2. K.L. Metlov, "Two-dimensional topological solitons in soft ferromagnetic cylinders", (2001), arXiv: cond-mat/0102311.
3. K.L. Metlov, Magnetization patterns in ferromagnetic nano-elements as functions of complex variable, *Phys. Rev. Lett.* 105, 107201 (2010).
4. K.L. Metlov, Young Pak Lee, Map of metastable states for thin circular magnetic nano-cylinders, *Appl. Phys. Lett.* 92, 112506 (2008).
5. K.L. Metlov, Vortex mechanics in planar nano-magnets, *Phys. Rev. B* 88, 014427 (2013).
6. A.B. Bogatyrev and K.L. Metlov, Magnetic states in multiply-connected flat nanoelements, *Low Temperature Physics / Fizika Nizkikh Temperatur*, v. 41, No. 10, pp. 984–988, 2015.
7. A.B. Bogatyrev and K.L. Metlov, Topological constraints on positions of magnetic solitons in multiply connected planar magnetic nanoelements, *Phys. Rev. B* 95, 024403 (2017).

**Анализ фрактальной структуры нанокompозитов,
полученных золь-гель методом
(по данным малоуглового рентгеновского рассеяния)**

*О. А. Шилова¹, Г. П. Копица^{1, 2}, Т. В. Хамова¹,
И. Н. Цветкова¹, Е. В. Тарасюк³, Ю. Гомза⁴*

¹ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

³ *Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова,
Магнитогорск, Россия*

⁴ *Институт высокомолекулярных соединений НАНУ, Киев, Украина*

Известно, что продукты золь-гель синтеза – золи, гели и ксерогели, как правило, являются фрактальными объектами [1–3]. В последнее время все больше исследователей в России и за рубежом используют фрактальный подход для характеристики неупорядоченных, в том числе, агрегационных структур, получаемых в процессе гидролитической поликонденсации алкоксидов кремния и других металлов [4–7]. В сообщении будут рассмотрены особенности фрактальной структуры золь-гель систем, полученных кислым гидролизом на основе тетраэтоксисилана в присутствии ортофосфорной кислоты при варьировании концентрации исходных компонентов золь, с добавками детонационного наноалмаза [8, 9], а также кремнезоль, модифицированных органическими олигомерами или легированных рядом солей металлов или созревающих в присутствии эпоксидной смолы [11, 12].

1. C.J. Brinker, G.B. Scherer, Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing. Academic Press, 1990, 908 p.
2. А. П. Шпак, В. В. Шилова, О. А. Шилова, Ю. А. Куницкий, Диагностика наносистем. Многоуровневые фрактальные наноструктуры. Ч. II. Киев, 2004, 112 с.
3. А. И. Максимов, В. А. Мошников, Ю. М. Таиров, Шилова О.А., Основы золь-гель технологии нанокompозитов. СПб.: Изд-во «Элмор», 2008.
4. L. Matejka, J. Plestil, K. Dusek J., Non-Cryst. Solids 114, 226 (1998).
5. I.E.Grachova, A.I. Maksimov, V.A. Moshnikov, Synch. Investig. 761, 3 (2009).
6. V.K. Ivanov, G.P. Kopitsa, Russ. J. Inorg. Chem. 150, 55 (2010).
7. Y.P. Gomza, V.V.Klepko et al. Polym. Sci. Ser. A 628, 52 (2010).
8. Shilov V.V., Gomza Yu.P., Shilova O.A. et al. / Synthesis, Properties and Applications of Ultrananocrystalline Diamond / NATO Science Series 299, 192 (2005).
9. I.N. Tsvetkova, O.A. Shilova, M.G.Voronkov et al., Glass Phys. Chem. 68, 34 (2008).
10. K.M. Sukhyu, Yu.P. Gomza et al. // J. Sol-Gel Sci. Technol. 472, 74 (2015).
11. T.V. Khamova, O.A. Shilova et al. Phys. Solid State 1, 56 (2014).
12. T.V.Khamova, O.A.Shilova et al. Synch. Investig. 113, 10 (2016).

Кулоновское увлечение электронов для велосипедистов

А. Г. Яшенкин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Лекция носит вводно-обзорный характер и адресована магистрантам и аспирантам, интересующимся физикой транспортных явлений в гетероструктурах. Она посвящена кулоновскому увлечению (КУ) электронов в двойных квантовых ямах (2КЯ). Явление КУ состоит в возникновении тока в пассивном слое 2КЯ в то время, когда в ее активном слое прикладывается электрическое поле, и возникает в результате взаимодействия между собой электронов, принадлежащих разным слоям. Мерой КУ является коэффициент транспроводимости (КТП).

В лекции рассматривается механический аналог КУ и дается простая качественная интерпретация этого явления. КТП интерпретируется как один из «смешанных» транспортных коэффициентов, описывающих корреляции между двумя различными операторами (таких, как термо-э.д.с.). Описание ведется в терминах диффузионного и/или баллистического движения взаимодействующих электронов, распространяющихся в случайных примесных потенциалах.

Качественно анализируются вклады в КТП от различных процессов, корреляционные эффекты, разнообразные температурные режимы для КТП, а также особенности мезоскопии в 2КЯ. Рассматриваются механизмы усиления КУ, специфика КУ в квантовых проволоках и необычных низкоразмерных системах, таких, как дробный квантовый эффект Холла и безмассовые дираковские фермионы (графен), возникновение в 2КЯ экзотических когерентных состояний. Проводится сравнение между КУ и спиновым КУ.

Стендовые доклады
Секция «Нейтронное рассеяние»

Crystal structure, the raman spectra of solid solutions $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$

A.S. Abiyev¹, A.V. Trukhanov², S.V. Trukhanov³, N.T. Dang⁴, S.H. Jabarov⁵

¹ *Baku State University, Baku, Azerbaijan*

² *SSPA Scientific and Practical Materials Research Centre of NASB, Minsk, Belarus*

³ *Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam*

⁴ *Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan*

M-type hexagonal barium ferrite ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) and solid solutions based on it are one of the most interesting and studied multiferroics. Hexaferrites are well-known ferromagnetic materials with strong uniaxial anisotropy and this anisotropy field can be controlled by the substitution of Fe^{3+} ions. These substitutions aim at developing materials with improved characteristics, which make hexaferrites suitable for technological applications. Little had been reported on the Ga^{3+} substituted barium ferrites. In this work, X-ray diffraction (at room temperature) and Raman spectra (at room temperature) have been investigated and analyzed in an attempt to explore the effect of Ga substitution for Fe the crystal structure of $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ ($x = 0.1, 0.3, 0.6, 0.9, 1.2$).

The X-ray diffraction measurement was performed using a Bruker D8 Advance powder diffractometer with the following parameters: 40 kV, 40 mA, Cu $K\alpha$ radiation ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$). The X-ray diffraction data were treated using the FullProf program.

The Raman spectra were measured using a LabRam spectrometer (NeHe laser with wavelength 632 nm, confocal slit 110 μm , $\times 50$ lens).

X-ray diffraction spectra of $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ measured at various Ga concentrations at room temperature. At the standard conditions, the diffraction spectra corresponded to the hexagonal crystal structure the space symmetry type $P63/mmc$. Figure 2 shows the concentration dependences of the unit cell parameters. This behavior is explained by the substitution of Ga^{3+} ions with lower radius ($r = 0.535 \text{ \AA}$) for Fe^{3+} ions with larger radius ($r = 0.645 \text{ \AA}$).

In the range 200–800 cm^{-1} , the spectra of $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ have eight peaks at $\nu \sim 289, 337, 413, 469, 525, 617, 684, \text{ and } 717 \text{ cm}^{-1}$, which agrees well with the results obtained in [20]. Modes $\nu \sim 289$ and 337 cm^{-1} are related to the O–Fe–O vibrations. Frequency $\nu \sim 413 \text{ cm}^{-1}$ is related to the vibrations of the Fe(5)/Ga(5) O_6 octahedra, and $\nu \sim 469$ and 525 cm^{-1} are associated with the vibrations of the Fe(1)/Ga(1) O_6 and Fe(5)/Ga(5) O_6 octahedra; $\nu \sim 617 \text{ cm}^{-1}$ is associated with the vibrations of the Fe(1)/Ga(1) O_6 , Fe(4)/Ga(4) O_6 , and Fe(5)/Ga(5) O_6 octahedra; $\nu \sim 684 \text{ cm}^{-1}$ is related to vibrations of bipyramidal Fe(2)/Ga(2) O_5 anion sublattices, and $\nu \sim 717 \text{ cm}^{-1}$ is related to the vibrations of tetrahedral Fe(3)/Ga(3) O_4 anion sublattices. The contribution from Ga^{3+} diamagnetic ions leads to the difference of the measured Raman spectra from the spectrum of the nonsubstituted hexagonal ferrite.

Исследование фрактальных свойств гидратированного оксида циркония при различных температурах отжига

Л. А. Азарова^{1,2}, Г. П. Копица¹, Е. Г. Яшина^{1,2}, В. М. Гарамус³, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

³ *Helmholtz Zentrum Geesthacht, Germany*

Диоксид циркония (ZrO_2) имеет множество промышленных применений благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. Этот материал является одним из ключевых для компонентов датчиков, катализаторов и носителей катализаторов, мембран, твердых электролитов в твердотельных окисных топливных элементах и т. д. Поэтому для различных задач важно уметь синтезировать структуры с заданными параметрами, такими как фрактальная размерность, удельная поверхность и размер частиц. Изменяя температуру отжига или рН можно получать структуры с необходимыми параметрами [1–3]. Однако систематические зависимости получаемой структуры диоксида циркония от температуры и рН на сегодняшний день плохо изучены, особенно в отношении фрактальной размерности. Таким образом, особый интерес в изучении фрактальных свойств представляет анализ влияния внешних воздействий на величину фрактальной размерности, а также исследование различных типов фрактальной организации и переходов между этими типами.

В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов определены параметры мезоструктуры гидратированного оксида циркония и их эволюция на разных стадиях термической обработки. Установлено, что частицы оксида циркония, имеющие структуру объемного фрактала с размерностью $D_V = 2.55$, в процессе отжига при температурах равной или большей $400\text{ }^\circ\text{C}$ трансформируются в ядро частицы со структурой поверхностного фрактала, имеющего размерность $D_S = 2.8$. Обнаруженная трансформация фрактала из объемного в поверхностный коррелирует с кристаллизацией частиц гидратированного оксида циркония при высоких температурах отжига. Предложена модель формирования фрактальной частицы, подразумевающей существование поверхностного фрактала на плотном кристаллическом ядре. Показано, что характерный радиус кристаллического ядра наночастиц ZrO_2 растет с повышением температуры отжига от $14\text{ }\text{\AA}$ до $200\text{ }\text{\AA}$ в диапазоне $400\text{--}600\text{ }^\circ\text{C}$, и насыщается при больших температурах.

1. V. K. Ivanov, G. P. Kopitsa, A. Ye. Baranchikov, M. Sharp, K. Pranzas, and S. V. Grigoriev. Russian Journal of Inorganic Chemistry, Vol. 54, No. 14, 2091–2106 (2009).
2. V. K. Ivanov, G. P. Kopitsa, A. E. Baranchikov, S. V. Grigor'ev, and V. M. Haramus. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2010, Vol. 55, No. 2, 155–161 (2010).
3. V.K. Ivanov, G.P.Kopitsa, O.S.Ivanova, A.Ye.Baranchikov, K.Pranzas, S.V. Grigoriev. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 75, 296–299, (2014).

Кристаллическая и магнитная структура гранулированных ферритовых порошков

*Б. К. Аргымбек^{1,2}, С. Е. Кичанов², Д. П. Козленко²,
Е. В. Лукин², А. Т. Морченко¹, Б. Н. Савенко²*

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Ферриты со структурой шпинели (ФШ) получили широкое распространение в различных областях благодаря разнообразию своих магнитных характеристик. Их физические и химические свойства в значительной мере зависят от распределения катионов. В частности, намагниченность этих систем определяется соотношением катионов в А и В положениях.

Дифракция нейтронов является весьма хорошим методом для выявления атомной и магнитной структуры, особенно для кристаллов, содержащих легкие элементы и элементы с близкими атомными номерами (в данном случае кислород и 3d-металлы), что во многих случаях (особенно в системах с разупорядочением легких атомов) затруднительно сделать с помощью рентгенографии. Магнитная нейтронография является единственным прямым методом, дающим полную информацию о магнитной структуре кристаллов (о величине и направлениях магнитных моментов атомов в элементарной ячейке (ЭЯ)).

Целью представленной работы было исследование изменений в кристаллической и магнитной структуре гранулированных порошков ФШ номинального состава $Mn_{0,676}Zn_{0,223}Fe_2O_4$ (700НМ) и $Ni_{0,32}Zn_{0,68}Fe_2O_4$ (1000НН) в зависимости от размеров гранул. Эксперименты по нейтронной дифракции при комнатной температуре проводились с помощью спектрометра ДН-6 на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 (ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна). Спектры регистрировались с использованием времяпролетной методики при фиксированном угле рассеяния $2\theta = 90^\circ$. Анализ данных производился методом Ритвельда по программе FullProf.

Установлено, что при увеличении размеров гранул в ФШ 1000НН наблюдается уменьшение вклада в магнитные дифракционные пики, что указывает на уменьшение магнитного момента в порошках этой марки. В то же время для 700НМ влияние размерных эффектов на магнитные подрешетки незначительно. При увеличении размеров гранул в образцах обоих составов незначительно изменяется параметр ЭЯ, что может указывать на уменьшение влияния поверхностных эффектов и увеличение вклада со стороны внутриобъемных межзеренных прослоек.

Магнитоиндуцируемые полимер-неорганические композиты с памятью формы на основе сополиуретанимидов и наночастиц ферритов

А. Н. Бугров^{1, 2}, Р. Ю. Смыслов^{1, 3}, Б. В. Васильев^{1, 2}, А. Л. Диденко¹,
С. А. Кириллова², Г. П. Копица^{3, 4}, В. В. Рунов³

¹ Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

³ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

⁴ Институт химии силикатов им. И. В. Гребениčkова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Разработка, исследование структуры и свойств новых полимер-неорганических композитов с магнитоиндуцируемым эффектом памяти формы на основе сегментных сополиуретанимидов, модифицированных наночастицами ферритов, – актуальная задача вследствие потенциального применения таких систем в аэрокосмической промышленности, микроробототехнике и медицине при создании конструкций с переменной геометрией, термочувствительных датчиков, магнитоуправляемых биосовместимых устройств, интеллектуальных имплантатов и искусственных мышц [1, 2].

Глицин-нитратным горением синтезированы сферические наночастицы (НЧ) ферритов: CoFe_2O_4 со структурой шпинели и $\text{Al}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ со структурой граната. Средний размер НЧ согласно данным ЭМ составил 60 ± 10 нм и 40 ± 10 нм, соответственно. Зависимости магнитного момента от напряжения магнитного поля при фиксированных значениях температуры (5, 300, 400 К) для НЧ ферритов определялись с помощью SQUID магнитометрии. Методом МУРП исследована мезоструктура сополиуретанимидов в зависимости от длины жесткого ароматического (пиромеллитовый диангидрид, парафенилендиамин; резорциновый диангидрид, 4,4-бис-(4-аминофенокси) дифенилсульфон), и гибкого алифатического (полипропилен гликоль с ММ 2300, полиэтиленадипат диолы с ММ 2500, 2700, 10000) сегментов. Размер доменов, образованных жесткими сегментами блоксополимеров лежит в диапазоне от 5 до 20 нм. НЧ магнитомягкого и магнитожесткого наполнителя как в нативном виде, так и модифицированные 3-аминопропилтриэтоксисиланом, вводились *in-situ* в матрицу сегментного сополиуретанимида на основе резорцинового диангидрида, 4,4-бис-(4-аминофенокси) дифенилсульфона и полиэтиленгликоля с ММ 2300, терминированного по концевым группам толуол-2,4-диизоцианатом. С помощью МУРПН выявлены закономерности формирования магнитной подструктуры и её влияния на надмолекулярную организацию сегментных сополиуретанимидов. Из анализа магнито-ядерного интерференционного вклада в интенсивность МУРПН получена оценка характерного размера МЯ кросскорреляций.

1. M. Yoonessi, J.A. Peck, et al. Transparent large-strain thermoplastic polyurethane magnetoactive nanocomposites // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2011. V. 3. P. 2686–2693.

2. Hu J., Zhu Y., et al. Recent advances in shape-memory polymers: Structure, mechanism, functionality, modeling and applications // Progress in Polymer Science. 2012. V. 37. No. 12. P. 1720-1763.

Фазовые диаграммы состояния KNO_3 в условиях ограниченной геометрии

А. А. Набережнов^{1, 2}, П. Ю. Ванина², А. Ciżman³,
Е. Rysiakiewicz-Pasek³, А. Hoser⁴

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

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

³ Wrocław University of Technology, Institute of Physics, Wrocław, Poland

⁴ Helmholtz Zentrum Berlin, Germany

Широко известно, что нитрат калия (KNO_3) в массиве может существовать в трех кристаллических фазах. Низкотемпературная параэлектрическая орторомбическая α -фаза при нагреве выше 400 К переходит в параэлектрическую тригональную β -фазу. При охлаждении же вместо прямого обратного перехода в диапазоне температур 393–378 К образуется метастабильная сегнетоэлектрическая γ -фаза [1]. Из [2] известно, что для тонких пленок KNO_3 γ -фаза остается стабильной даже при температурах ниже комнатной (RT), однако, причина осталась невыявленной. Исходя из этого целью работы было изучение температурной эволюции структуры НКМ на основе пористых стекол, содержащих внедренные в поры наночастицы KNO_3 с разным характерным размером (320 (PG320), 46 (PG46) и 7 (PG7) нм) методами дифракции нейтронов (дифрактометр E9 HZB, Берлин, $\lambda = 1.7982 \text{ \AA}$) и рентгеновского излучения (дифрактометр Supernova СПбПУ, $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$).

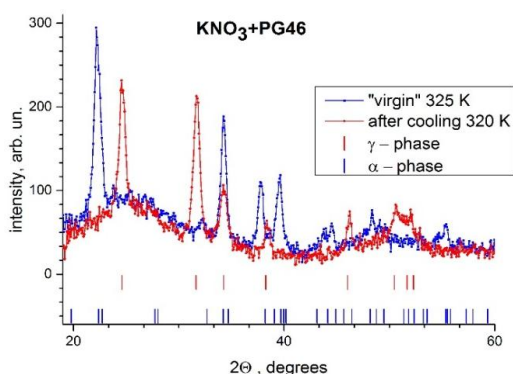


Рис. Дифрактограммы для $\text{PG46} + \text{KNO}_3$ для исходного образца (синие точки и линия) при 325 К и после цикла «нагрев-охлаждение» при 320 К (красные точки и линия). Вертикальные штрихи внизу – положения упругих пиков для переходов γ (красные) и α (синие) фаз

Для первой серии образцов (PG320) никаких особенностей температурной эволюции структуры, как и уширения упругих пиков в следствие размерного эффекта обнаружено не было, а это значит, что KNO_3 в PG320, сохраняет свойства массивного вещества.

В НКМ $\text{PG46} + \text{KNO}_3$ из расплава характерный размер наночастиц нитрата калия составлял 42(4) нм. Упругие пики для НКМ $\text{PG46} + \text{KNO}_3$ (из раствора) несколько шире (рис.), что свидетельствует о меньшем размере наночастиц KNO_3 – он составляет около 30(3) нм.

В обоих НКМ $\text{PG7} + \text{KNO}_3$ характерный размер наночастиц KNO_3 в PG7 составляет примерно 20(2) нм. Таким образом можно утверждать, что существует критический характерный размер наночастиц KNO_3 в диапазоне 20–40 нм, меньше которого в ограниченной геометрии реализуется только сегнетоэлектрическая фаза.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 14-22-00136).

1. J.K. Nimmo, B.W. Lucas, Acta Cryst. B 32(7), 1968-1974 (1976).

2. R.B. Godfrey, J.F. Scott, C.A. Araujo, L.D. McMillan, Ferroelectr. Lett. 5, 167-172 (1986).

Кристаллическая структура $TiFe_{0,95}Ga_{0,05}S_2$ при низких температурах

Р. Ф. Гашимов¹, Э. Б. Аскеров^{2,3}, Э. М. Керимова¹

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Национальный центр ядерных исследований, Баку, Азербайджан*

В последнее время исследования слоистых и цепочечных полупроводников, входящих в общую химическую группу соединений $A^3B^1C^6_2$ представляют большой научный интерес. Это связано с значительным разнообразием целого ряда уникальных физических свойств, обнаруженных в данных материалах, включающие в себя вследствие сильной анизотропии физических свойств вдоль различных кристаллографических направлений. К таким материалам относятся и тройные соединения составов $TiFeS_2$ и $TiFeSe_2$, входящие в общую группу полупроводников типа $TiMeX_2$ (где $Me - Fe, Ga, X = S, Se, Te$).

Одним из представителей таких кристаллических веществ, являются тройные соединения составов $TiGaS_2$ и $TiFeS_2$. Для установления механизмов нестабильности магнитной фазы $TiFe_{1-x}Ga_xS_2$ при низких температурах и разработки теоретических моделей требуется информация о температурном поведении структурных и магнитных параметров при низких температурах. В настоящей работе проведено исследование кристаллической и магнитной структуры $TiFe_{0,95}Ga_{0,05}S_2$ методом нейтронной дифракции в диапазоне температур 5–290 К.

Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на дифрактометре ДН_2 [11, 12], расположенном на высокопоточном импульсном источнике нейтронов, реакторе ИБР-2 (ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна) в температурном интервале 10–295 К.

При комнатной температуре нейтронный дифракционный спектр соответствует моноклинной симметрии $C2/m$. Рассчитанные из дифракционных данных значения параметров элементарной ячейки в нормальных условиях для $TiFe_{0,95}Ga_{0,05}S_2$ составляют: $a = 11,614(3) \text{ \AA}$, $b = 5,304(1) \text{ \AA}$, $c = 6,813(4) \text{ \AA}$, $\beta = 116,8(2)^\circ$, что хорошо согласуется с результатами, полученными ранее. При температуре $T < 747 \text{ К}$ наблюдается антиферромагнитный фазовый переход для $TiFe_{0,95}Ga_{0,05}S_2$.

Structural polymorphism of Ti-doped BaMnO₃

*S.H. Jabarov¹, N.T. Dang², D.P. Kozlenko³, S.E. Kichanov³,
A.I. Mammadov¹, B.N. Savenko³*

¹ *Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan*

² *Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam*

³ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

Multiferroic materials, exhibiting simultaneously ferroelectric and magnetic orders, are at the forefront of extensive fundamental and applied research. The emergence of ferroelectricity in the antiferromagnetic 2H BaMnO₃ was also theoretically predicted at low temperature. The emergence of ferroelectricity in the antiferromagnetic 2H BaMnO₃ was theoretically predicted at low temperature. In this work, we present a systematic study of the structural and magnetic properties of BaMn_{1-x}Ti_xO₃ in the concentrations range $0 < x < 0.25$.

Neutron powder diffraction measurements were performed in the wide temperature range 10 e 300 K with the DN-12 diffractometer at the IBR-2 high-flux pulsed reactor (FLNP JINR, Dubna, Russia). Diffraction patterns were collected at a scattering angle of 90° with resolution $\Delta d/d = 0.015$. The typical data collection time at one temperature was 2 h. Experimental data of the X-ray and neutron powder diffraction experiments were analyzed by the Rietveld method using the Fullprof program.

For undoped BaMnO₃ the observed diffraction peaks correspond to the 15R rhombohedral unit cell of R-3m symmetry with lattice parameters $a \approx 5.7 \text{ \AA}$, $c \approx 35.3 \text{ \AA}$. A sequence of the structural phase transitions 15R → 8H → 9R → 10H → 12R was observed upon Ti doping. The structural parameters of the observed phases were determined. Antiferromagnetic ordering in the 15R, 9R and 8H structural phases was observed at low temperatures. The magnetic propagation vector is $q = (0 \ 0 \ 1/2)$ for the 15R and 9R phases and $q = (0 \ 0 \ 0)$ for the 8H phase. The magnetic ordering temperatures and the ordered Mn magnetic moments are suppressed rapidly with increase of the Ti concentration from $T_N = 230 \text{ K}$ ($x = 0$) to 100 K ($x = 0.25$) and $m = 2.0$ to $1.2 \mu_B$, respectively.

Морфотропная фазовая граница в мультиферроидных твердых растворах PFW-РТ

А. А. Набережнов^{1, 2}, И. А. Долгаков², М. Товар³, О. А. Алексеева²

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

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

³ Helmholtz Zentrum Berlin, Germany

В последнее десятилетие наблюдается возрастающий интерес к материалам, проявляющим взаимосвязь магнитных и сегнетоэлектрических свойств, в особенности – при комнатной температуре.

Одним из таких соединений является твердый раствор PFW-РТ $((1-x)\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3-(x)\text{PbTiO}_3)$, который, к тому же, в высокотемпературной фазе имеет хорошо изученную структуру перовскита, а недавние диэлектрические исследования показали наличие перехода от релаксорного поведения к сегнетоэлектрическому при увеличении концентрации РТ.

Температурная эволюция кристаллической структуры $(1-x)\text{PFW}-x\text{РТ}$ при $x = 0,2$ и $x = 0,3$ была исследована методом порошковой дифракции нейтронов в области морфотропной фазовой границы (МФГ), поскольку именно в этом диапазоне растворы такого типа демонстрируют наиболее интересные макроскопические свойства, такие как высокие значения диэлектрической проницаемости, пьезоэлектрического отклика, электрострикции и т. д.

Существование кубической и тетрагональной фаз было обнаружено в растворах состава 0,2 и 0,3 в диапазонах температур 140÷345 К и 150÷395 К соответственно. Более того – была получена температурная зависимость процентного соотношения фаз. В результате полнопрофильного анализа было получено аномально большое значение фактора Дебая-Валлера свинца, которое возрастало при понижении температуры, что навело на мысль о необходимости изменения структурной модели. Приняв во внимание то, что в свинецсодержащих перовскитах ион свинца смещен из высокосимметричной позиции [1] и используя подход, примененный авторами работы [2] к установлению структуры чистого PFW, нами были оценены статические смещения свинца в PFW-РТ, составившие $\sim 0,1$ Å.

1. S. Vakhrushev, S. Zhukov, G. Fetisov, V. Chernyshov "The high-temperature structure of lead magnoniobate" // *J. Phys. Condens. Matter*, v. 6, № 22, pp. 4021–4027 (1994).

2. Ivanov S.A., Eriksson S.G., Tellgren R., Rundlöf H. *Mat. Res. Bull.* 39 (14-15), 2317-2328 (2004).

**Исследование методами дифракции и рассеяния нейтронов
структурно-энергетического состояния поверхности наночастиц
на основе ZrO_2 в условиях химической адсорбции воды**

*А. С. Дорошкевич^{1, 2}, А. Х. Исламов¹, А. И. Любчик³, А. В. Шило³, Т. Ю. Зеленьк⁴,
А. В. Сапрыкина³, Х. Т. Холмуродов^{1, 4}, В. А. Турченко¹, А. Набиев¹, Э. Асгеров¹,
А. Мададзада¹, А. И. Бескровный¹, В. И. Боднарчук¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Донецкий физико-технический институт НАНУ, Киев, Украина

³ CENIMAT, Department of Materials Science, Universidade NOVA de Lisboa
and CEMOP/UNINOVA, Campus de Caparica, Caparica, Portugal

⁴ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

⁵ Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, Донецк, Украина

Высокая доля поверхностной составляющей в пористых нанодисперсных системах является одним из преимуществ по сравнению с крупнозернистыми аналогами. Энергия ионизации молекулы газа, как правило, существенно превышает работу выхода электронов из твердых тел, поэтому контактирующая с атмосферой обобщенная поверхность нанопорошковой системы обладает свойствами полупроводникового гетероперехода. Следовательно, адсорбция сопровождается электронным обменом между твердой и газовой фазами. Действительно, для пары: молекула H_2O – ZrO_2 наночастица (энергия ионизации и работа электронной эмиссии соответственно: $A_{H_2O} \geq 12$ эВ [1–3], $A_{ZrO_2} \leq 6$ эВ [4, 5]) разность потенциалов между материалом наночастицы и адсорбционным слоем $\Delta\phi_k = \Delta A / e$, где $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл – будет не менее 9 В, а электрическое поле $E = \Delta\phi_k / h$ при условии, что длина связи h адсорбата соизмерима с длиной связи в кристаллической решетке ZrO_2 : $h = 0.33 \div 0.51$ нм (для плоскостей (111) и (110)) будет иметь величину порядка $E = 1,8 \cdot 10^{10}$ В/м, что достаточно для смещения электронной плотности и эвакуации при части электронов в атмосферу [4].

Исследование структурных изменений материала наночастиц (9 нм) состава ZrO_2 –3mol% Y_2O_3 , вызванных перезарядкой ионов приповерхностного слоя в результате межфазного электронного обмена, с использованием ядерно-физических методов было целью данной работы.

Авторы благодарят за поддержку грант «H2020/MSCA/RISE/HUNTER/691010».

1. Itikawa Y., Mason N. // J. Phys. Chem. Ref. Data. **34**, 1, (2005).

2. Л.В. Гурвич, Г.В. Карачевцев, В.Н. Кондратьев и др. Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродства к электрону. М.: «Наука». 351 с., (1974).

3. Ю.В. Ковтун // ЖТФ, **85**, 8, 6, (2015).

4. Птицын В.Э. // ЖТФ, **77**, 4, 113, (2007).

5. В.М. Зайнулина, В.П. Жуков, В.М. Жуковский и др. // ЖСХ, **41**, 2, 229, (2000).

Вычисление полевой зависимости магнитного форм-фактора инвертированной опалоподобной структуры в рамках модели микромагнетизма

*И. С. Дубицкий¹, А. В. Сыромятников^{1, 2}, Н. А. Григорьева²,
А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Шишкин¹, С. В. Григорьев^{1, 2}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

Совершенствование методов малоуглового рассеяния нейтронов (SANS) привело к возможности измерения тонких особенностей магнитного строения наноструктур. Однако детальная интерпретация данных SANS часто бывает затруднена. Для однозначного объяснения результатов экспериментов необходимо вычислить магнитный форм-фактор определяемый распределением намагниченности в образце. В свою очередь, распределение намагниченности может быть найдено посредством решения уравнений микромагнетизма. Настоящая работа посвящена реализации данной программы для инвертированных опалоподобных структур (ИОПС), выполненных из кобальта.

ИОПС получают заполнением пустот между микросферами, образующими ГЦК решетку, ферромагнитным металлом с последующим удалением самих сфер. В результате формируется периодическая ферромагнитная сеть наноузлов в форме тетраэдров и кубов, связанных между собой ножками-перемычками вдоль направлений $\{111\}$ ГЦК структуры [1]. Ножки имеют анизотропную форму, поэтому их магнитные моменты можно считать изинговскими, при этом минимум энергии достигается в состоянии, которое можно описать с помощью правила спинового льда.

В данной работе было найдено распределение намагниченности в элементарной ячейке ИОПС при приложении магнитного поля вдоль трех важнейших осей мезоструктуры инвертированного опала $[100]$, $[1\bar{2}1]$, $[111]$. Затем были получены зависимости величин магнитных форм-факторов от внешнего поля. Сопоставление результатов вычисления и экспериментальных данных SANS позволило объяснить некоторые характерные особенности экспериментальных кривых. Так точка пересечения ветвей кривой гистерезиса, имеет минимальное значение по оси абсцисс при включении поля вдоль оси $[100]$ и максимальна при включении поля вдоль $[111]$, что связано с различными конфигурациями намагниченности в тетраэдрах при подаче поля вдоль данных направлений. Также установлено, что максимум на кривой гистерезиса, наблюдаемый при приложении поля вдоль оси $[1\bar{2}1]$ соответствует максимальному значению компоненты намагниченности перпендикулярной полю. Данные эффекты были предсказаны в рамках феноменологической модели ИОПС [2] и свидетельствуют о принадлежности инвертированных опалов на основе кобальта к классу трехмерных искусственных спиновых льдов.

1. Grigoryeva, N. A., Mistonov, A. A., Napolskii, K. S., Sapoletova, N. A., Eliseev, A. A., Bouwman, W., ... & Vasilieva, A. V. (2011). *Physical Review B*, **84**(6), 064405.
2. Mistonov, A. A., Grigoryeva, N. A., Chumakova, A. V., Eckerlebe, H., Sapoletova, N. A., Napolskii, K. S., & Grigoriev, S. V. (2013). *Physical Review B*, **87**(22), 220408.

Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения и нейтронов на 3D-упорядоченных нанокompозитах на основе опаловых матриц

С. Н. Ивичева, Ю. Ф. Каргин

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

Синтез нанокompозитов на основе опаловых матриц (ОМ) основан на заполнении порового пространства плотнейшей шаровой упаковки ОМ различными веществами, которое может быть двух видов, это или полное заполнение тетраэдрических (Т-) и октаэдрических (О-) пустот, или преобладающее заполнение Т-пустот в силу их меньших размеров над октаэдрическими. По аналогии с кристаллическими структурами, где заселение тех или иных позиций атомами определяет структуру и свойства кристалла, становится очевидным, что разное заполнение пустот в ОМ будет определять структуру композитов, для изучения которой активно используются методы малоуглового рассеяния (МУР). Методами МУР нейтронов исследована структура трехмерных упорядоченных нанокompозитов на основе одинаковых ОМ разного состава. В области переданных импульсов соизмеримых с параметрами структуры нанокompозита можно наблюдать дифракционные рефлексы, соответствующие ГЦК структуре, которая может быть отнесена к разным структурным типам в зависимости от заполнения пустот. Структура исходной ОМ соответствует ГЦК трехслойной плотнейшей упаковке из глобул кремнезема с пространственной группой $Fm\bar{3}m$, (структурный тип меди), с координационным числом (КЧ) для глобул $\text{SiO}_2 = 12$. При последовательном многоразовом заполнении исходной ОМ, например, кремнезолями, происходит преимущественно первоочередное заполнение Т-пустот плотнейшей шаровой упаковки ОМ, а О-пустоты, в силу их больших размеров, остаются заполненными не до конца. При преимущественной заселенности Т-пустот ОМ структура ячейки композита трансформируется в структурный тип флюорита A_2B , с КЧ (глобул SiO_2)=8 ($m\bar{3}m$) и КЧ (заполненных золем Т-пор)=4 ($\bar{4}3m$), что отражается на картине дифракции нейтронов и приводит к исчезновению дифракционного рефлекса (200). Когда в плотнейшей упаковке ОМ заселены и Т- и О-пустоты (в композитах с титанатом висмута), то тип структуры композита можно отнести к структурному типу A_3B или структуру такого композита можно рассмотреть с позиций вставленных друг в друга подрешеток. По данным МУР и математическому моделированию была произведена оценка структурных параметров композитов на основе ОМ в зависимости от заполнения порового пространства различными материалами.

Авторы выражают особую признательность А. С. Иванову (ILL, Гренобль) и С. В. Амарантову (ИК РАН).

Высокоэнергетические электромагнитные процессы в грозовых разрядах

А. А. Кожанов, А. В. Орищенко

*Дмитровградский инженерно-технологический институт,
филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»,
Ульяновск, Россия*

Инициирование молнии и механизм развития генерации проникающих излучений в поле грозовых облаков – нерешенная проблема, связанная с грозовой активностью. Гипотеза о возможности ускорения заряженных частиц до высоких энергий полями грозовых облаков высказана Вильсоном в 1924 г.

Идея о том, что начальные стадии молний развиваются с участием убегающих электронов (УЭ), это позволяет связать с низкой напряженностью грозового поля. В корреляции с грозовой активностью регистрировались необычайно мощные и короткие радио и γ -импульсы. В основе лежит механизм о развитии лавин релятивистских убегающих электронов (ЛРУЭ), инициируемых космическим излучением [1].

Возможны слабые взаимодействия электронов высоких энергий с протонами атомных ядер, $e^-(p^+, n) \nu$ (порог 0.78 МэВ), и фотоядерные реакции (γ, X_n) с участием тормозного излучения электронов высоких энергий.

Что же касается фотоядерных реакций, то пробеги фотонов с $\varepsilon_\gamma > \varepsilon_{th}(\gamma, 1_n)$ намного превосходят поперечные размеры каналов молнии, так что фотоядерные нейтроны могут генерироваться в основном вне каналов в процессе распространения γ -излучения в атмосфере, даже если импульсы нейтронов коррелированы с ЭМИ молнии.

Поскольку генерация нейтронов сопровождается эмиссией электронов высоких энергий, рентгеновского и γ -излучений, то эти излучения способны вызывать те же эффекты в датчиках, что и продукты реакций с участием нейтронов (протоны, тритоны, α -частицы). Следовательно, нейтроны могут генерироваться в крупномасштабных полях грозовых облаков до разрядов молнии.

1. Бабич, Л.П. Об усилении потока фотоядерных нейтронов в грозовой атмосфере и возможности его регистрации / Л.П. Бабич // Письма в ЖЭТФ **97**, 6, сс 333-339 (2013).

Исследование морфологии и пористости горных пород, представленных долеритами из Центральной Сибири

Г. П. Копица^{1, 2}, С. Н. Лесовая³, Т. В. Хамова², L. Almásy⁴

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт наук о Земле СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Wigner Research Centre for Physics, Institute for Solid State Physics and Optics,
Budapest, Hungary*

Изучение закономерностей почвообразования и выветривания на различных почвообразующих породах продолжает оставаться одной из точек роста современного генетико-географического почвоведения. Почвообразование и выветривание на ультраосновных (или ультрамафических) породах, легко изменяющихся в зоне гипергенеза, и в которых содержание SiO₂ составляет менее 45 %, представляет интерес для понимания глобальных закономерностей распространения процессов, идущих в педосфере, а также биологических и биогеохимических процессов, в том числе имеющих прикладное значение.

Целью настоящей работы являлось изучение морфологии и пористости горных пород, представленных долеритами из Центральной Сибири. В качестве основных методов анализа структуры долеритов использовали методы МУРН и низкотемпературной адсорбции азота.

Из анализа изотерм адсорбции и десорбции были получены оценки удельной площади поверхности $S_{БЭТ}$ и пористости, а также построены распределения пор по размерам.

Из экспериментальных сечений рассеяния $d\Sigma(q)/d\Omega$ нейтронов получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы рассеивающих неоднородностей R_c и удельные площади их поверхности $S_{уд}$, а также оценки фрактальной размерности D_s их поверхности. Проведено сравнение данных МУРН с результатами, полученными методами РФА и СЭМ.

Magnetic structure of quasi-two dimensional honeycomb lattice tellurate $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ in ground state

A.N. Korshunov^{1, 2}, A.I. Kurbakov^{1, 2}, S.Yu. Podchezertsev²

¹ Saint Petersburg State University, Russia

² B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC “Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia

Layered oxides of alkali and transition metals are presently investigated due to the different reasons: (i) possibility of their use as electrode materials for lithium-ion or sodium-ion batteries and (ii) rich variety of magnetic and electronic phenomena such as, for example, quasi-two-dimensional magnetism with different types of spin ordering [1]. Magnetic properties of these compounds are closely related to their crystal structures therefore crystal and spin structure of $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ have been studied in the present work.

Initially the magnetic susceptibility and specific heat were measured for the studied compound, where clear anomalies due to the antiferromagnetic transition were found in the temperature dependences of these quantities at $T_N = 27$ K. The experimental low-temperature data of neutron measurements (G4.1, LLB, Saclay, France; $\lambda = 2.428$ Å) have shown additional reflections associated with the neutron magnetic scattering, that appear at temperatures below T_N . All the magnetic peaks at 1.7 K can be indexed with a commensurate propagation vector $\mathbf{k} = (1/2\ 0\ 0)$. Possible irreducible representations were tested by refining the differential powder diffraction pattern (1.7–30 K) using the scaling factor and the peak shape parameters determined from the crystal structure refinement. During the analysis, we have found that the magnetic moment of nickel atoms preferably directed along the c-axis with z-component equals to $M_z = 1.68(1) \mu_B$, but y-component has also nonzero value equal to $M_y = 0.39(2) \mu_B$. Without y-component of magnetic moment, the obtained structure can be considered as known zigzag ferromagnetic chains coupled antiferromagnetically in ab-plane [1]. In this case the interlayer interactions along the c-direction are significant and they have antiferromagnetic nature. The presence of y-component leads to a slight ferromagnetic interaction along the c-direction according to symmetry transformations of irreducible representation.

This work was supported by the RFBR (project 16-02-00360).

1. P.H.Y. Li, R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, C.E. Campbell, *Phys. Rev. B* **86**, 144404 (2012).

Электронный спиновый резонанс в магнетике типа «спиновая лестница» $(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{CuBr}_4$

Ю. В. Красникова^{1,2}, В. Н. Глазков^{1,2}, Д. Шмидигер³, А. И. Желудев³

¹ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва, Россия

³ Neutron Scattering and Magnetism, ETH Zurich, Switzerland

Свойства системы спинов с антиферромагнитным взаимодействием существенно зависят от геометрии обменных связей. Как правило, с понижением температуры в системе обменно-связанных спинов происходит формирование дальнего магнитного порядка. В системах со специальной геометрией обменных связей этого может не происходить. Изучаемый нами магнетик типа «спиновая лестница» как раз относится к таким системам. «Спиновая лестница» представляет из себя две обменно-связанные цепочки, взаимодействие внутри и между которыми описывается двумя обменными интегралами.

Нами изучалось методом ЭПР соединение типа «спиновая лестница» $(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{Cu}_{(1-x)}\text{Zn}_x\text{Br}_4$, в котором часть магнитных ионов меди была замещена немагнитными ионами цинка. Нейтронографические исследования этих образцов [1] показало, что вокруг примесных центров формируются «островки» скоррелированных спинов. Ранее нами были изучены свойства этого магнетика при $x = 0$ в различных ориентациях относительно поля [2]. На температурной зависимости ширины линии ЭПР в чистом образце (рис.) можно выделить несколько режимов: при $T > 80$ К ширину линии определяет спин-решёточная релаксация, усиливающаяся с нагревом, при $15 < T < 80$ К ширина линии растёт с охлаждением из-за установления ближних спин-спиновых корреляций, ниже 10К ширина линии ЭПР уменьшается с охлаждением из-за вымерзания триплетных возбуждений. При переходе от режима установления ближних корреляций к режиму газа термоактивированных квазичастиц наблюдается максимум на температурной зависимости ширины линии.

Обнаружилось, что с введением примеси линия сигнала поглощения становится уже в диапазоне температур от 4.2 до 25 К по сравнению с линией сигнала от недопированного образца. Этот эффект усиливается с ростом концентрации примеси цинка. Интенсивность сигнала ЭПР при этих температурах соответствует отклику делокализованных возбуждений. Это означает, что с введением примеси увеличивается время жизни возбуждений в системе. Такое поведение является не характерным при введении примеси и вызывает отдельный интерес.

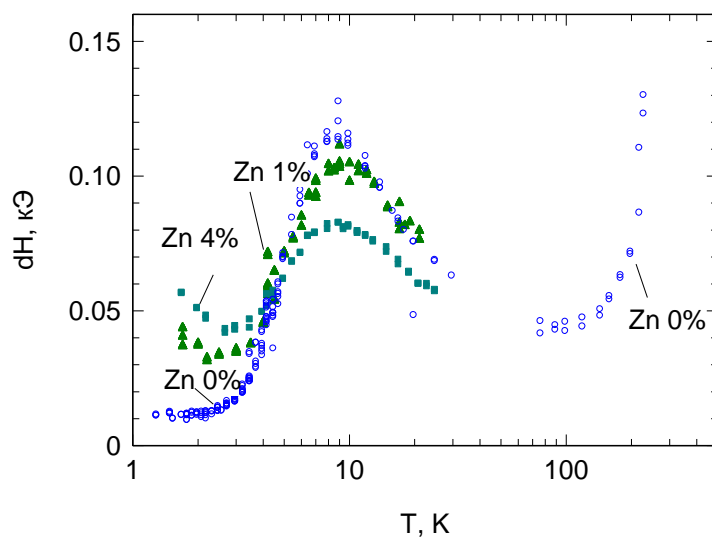


Рис. Зависимость полуширины линии от температуры для $(C_7H_{10}N_2)_2CuBr_4$ с различным допированием Zn

1. D. Schmidiger arXiv:1603.00070v1
2. V. N. Glazkov, M. Fayzullin, Yu. Krasnikova, G. Skoblin, D. Schmidiger, S. Muhlbauer, and A. Zheludev // Phys. Rev. B, 92, 184403, (2015).

Нейтроннографический анализ наноразмерных порошков нестехиометрического карбида ниобия

*В. С. Кузнецов¹, А. И. Гусев², А. С. Курлов²,
И. А. Бобриков¹, А. М. Балагуров¹, А. А. Ремпель²*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

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

На сегодняшний день, изучение влияния нестехиометрии и малого размера частиц на структуру, а, следовательно, и на свойства веществ, является актуальной, но трудно выполнимой задачей. Это связано с высокой сложностью получения наноразмерных сильно нестехиометрических образцов. Их мало, в основном это сверхтвердые кубические карбиды и нитриды переходных металлов IV и V групп. В качестве объекта исследования в данной работе был выбран карбид ниобия NbC_y со степенью заполнения углеродной подрешетки $y = 0.77$.

Карбид ниобия – это сверхтвердый материал, почти не подверженный коррозии; используется, в основном, как легирующая добавка, обеспечивающая дисперсионное упрочнение жаропрочных и термостойких сталей, при создании наноструктурированных твердых сплавов, предназначенных для металлообработки, горнопроходческих и бурильных работ.

Одним из эффективных способов получения нанокристаллических порошков является механический размол, в частности – высокоэнергетический размол в планетарной шаровой мельнице. Основным методом для изучения строения вещества, с точки зрения размеров кристаллитов и величины микронапряжений, является дифракция рентгеновского и нейтронного коротковолнового излучения.

В работе проведено исследование особенностей кристаллического строения и микроструктуры дефектного материала NbC_{0.77} с разным размером кристаллитов: исходный образец с размером частиц 2.5 мкм и размолотый, с разной степенью интенсивности, до порошка с размером частиц 60, 50 и 40 нм. В качестве инструмента для получения нейтронограмм был использован фурье-дифрактометр высокого разрешения (ФДВР, реактор ИБР-2, ОИЯИ, Дубна), работающий по методу обратного времени пролета.

Исследование магнитных свойств массивов нанонитей на основе железа

*Д. Ю. Лихачев^{1, 2}, А. А. Мистонов^{1, 2}, И. С. Шишкин²,
К. С. Напольский³, Н. А. Григорьева¹, С. В. Григорьев^{1, 2}*

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Массивы упорядоченных магнитных нанонитей являются перспективными системами с точки зрения создания устройств хранения информации с высокой плотностью записи. При этом каждая нить, намагниченная в ту или иную сторону, является битом информации. Однако сильное взаимодействие между нитями, сопровождающееся возникновением сильных размагничивающих полей, а также особенности перемагничивания каждой отдельной нити [1, 2] могут препятствовать как корректной записи, так и считыванию. Решением данной проблемы может быть тщательный подбор геометрических параметров и материала нитей, уменьшающих влияние вышеописанных факторов.

В данной работе исследуются массивы магнитных нанонитей на основе железа. Образцы были созданы методом электрохимического осаждения железа в цилиндрических каналах анодного оксида алюминия.

Была проведена аттестация образцов методами сканирующей электронной микроскопии и широкоугольной рентгеновской дифракции. Показано, что нити диаметром около 60 нм и длиной 40–50 мкм упорядочены в гексагональную решётку с расстоянием между нитями около 100 нм. Материал нитей представляет собой α -Fe, однако не все поры матрицы заполнены.

Для исследования магнитных свойств были проведены эксперименты по магнитометрии с помощью квантового интерферометра (СКВИД-магнитометрии) и малоугловой дифракции нейтронов при различных направлениях внешнего магнитного поля относительно длинной оси нитей. Получены кривые перемагничивания для полной намагниченности и для интенсивности магнитного рассеяния нейтронов. Определены коэрцитивное поле, и поле насыщения. Построены угловые зависимости коэрцитивной силы, свидетельствующие о наличии взаимодействия между нитями, однако без изменения механизма перемагничивания нити.

1. A.P. Chumakov, S.V. Grigoriev, N.A. Grigoryeva et al., Physica B 406 (2011) 2405–2408.

2. С.В. Григорьев, Н.А. Григорьева, К.С. Напольский и др., Письма в ЖЭТФ 94(8) (2011) 678–684.

Численное исследование многократного малоуглового рассеяния нейтронов на фракталах

Д. В. Львов^{1, 2}, Ф. С. Джепаров^{1, 2}, И. В. Мануйлова²

¹ Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

Метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) [1] широко используется для получения информации о параметрах неоднородностей исходя из данных об упругом рассеянии нейтронов на объектах, размеры которых существенно превышают длину волны излучения. Иногда малоугловое рассеяние – единственный метод получения прямой структурной информации о системах с хаотическим расположением неоднородностей. В некоторых случаях структура материалов может быть описана с помощью фрактальной геометрии, которая количественно учитывает пространственную неупорядоченность системы.

Мы провели теоретический и численный анализ многократного МУРН на фракталах в рамках теории Мольер. Определена зависимость интенсивности многократного МУРН от кратности рассеяния и от фрактальной размерности. Обычно при однократном МУРН фрактальную размерность определяют по наклону линейного участка в зависимости интенсивности от вектора рассеяния в дважды логарифмических координатах. Вычисления многократного МУРН показали, что при кратностях рассеяния $N \sim 5 - 10$ линейный участок сохраняется, но его наклон становится меньше, а при больших N линейный участок почти пропадает.

В многократном МУРН также проводилось определение размерности фрактала исходя из зависимости ширины ω линии МУРН от толщины образца [2]. Мы получили, что выход на зависимость $\omega \sim N^\alpha$, где α определяется размерностью фрактала, полученную в пределе бесконечно большой кратности рассеяния [3], происходит при довольно малых кратностях рассеяния $N \geq 5$. Данный результат показывает возможность исследования фракталов на основе зависимости ширины линии МУРН от кратности рассеяния в области небольших кратностей.

1. Свргун Д. И., Фейгин Л. А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние, Москва: Наука, 1986.
2. Г.П. Копица, С.В. Григорьев, В.В. Рунов и др. ЖЭТФ 2005, т. 128, с. 497.
3. S.V. Maleyev, Phys. Rev. B 1995, v. 52, p. 13163.

A study of structural and dielectric properties of HDPE + ZrO₂ nanocomposites by small angle neutron scattering and dielectric spectroscopy

*A.A. Nabiyev^{1, 2}, A.Kh. Islamov¹, A.M. Maharramov², R.S. Ismayilova²,
M.A. Nuriyev², A.S. Doroshkevich¹, V.A. Turchenko¹, A.I. Kuklin¹*

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

² *Institute of Radiation Problems of ANAS, Baku, Azerbaijan*

Structural and dielectric properties of HDPE+ZrO₂ nanocomposites were studied by the methods of Small Angle Neutron Scattering and Dielectric Spectroscopy. New highly-density polyethylene matrix samples were obtained using ZrO₂ particles of size 20–30 nm (Sky Spring, Inc. Nanomaterials Product #: 8512QI, ZrO₂, 99.9% of 20–30 nm [1]) with spherical morphology by thermal pressing method under pressure of 15 MPa and at a temperature of 165 °C. Experimental studies were carried out for both pure highly-density polyethylene and nanocomposites with different percentages of fillers (1%, 3%, 5%, 10% and 20%) and obtained results were compared. The frequency dispersion of dielectric permittivity (real (ϵ') and imaginary (ϵ'') part) and dielectric loss angle ($\tan\delta$) were studied in the frequency range of 25 Hz ÷ 1 MHz in the room temperature. The temperature dependences of these parameters in the constant frequency of 1 kHz were also measured in the temperature range of 25÷165 °C. The dielectric permittivity, the dielectric loss angle and the conductivity was determined as a function of temperature, frequency and filler volume. The obtained results showed that dielectric permittivity and dielectric loss was increased depending on filler volume. Values of these parameters were high in low frequencies (100 Hz, 1 kHz) and vice versa (500 kHz, 1 MHz). This decrease was explained with dipole polarization in electric field [2–4].

Small Angle Neutron Scattering techniques is one of accurate and important methods which allows to study conformations, shape and orientation of macromolecular polymer, thermodynamics and phase structure of the filler, interracial processes between the polymer matrix and the filler, the structural details of the complicated nanocomposite construction [5].

Small-angle neutron scattering (SANS) is a well-established characterization method for microstructure investigations in various materials. It can probe inhomogeneities from the near atomic scale (1 nm) to the near micron scale (600 nm).

SANS experiments were performed at the time-of-flight YuMO spectrometer (IBR-2M reactor, Dubna) [6]. The experiments were carried out at sample-to-detector distances of 5.28 and 13.04 m, resulting in a Q range of 0.005–0.4 Å⁻¹.

In addition the following parameters were calculated for ZrO₂ nanopowder and polymer matrix nanocomposites (1–20%) using ATSAS software [7]: total excluded DAM volume (V_{total}), phase radius of gyration (R_g), maximum phase diameter (D_{max}), number of aggregation (N_{Agg}). Number of aggregation (N_{Agg}) was about 4 for the ZrO₂ nanopowder and ranged between 1.2–1.5 for polymer composite system. It is

assumed that ZrO_2 nanoparticles mainly distributed in polymer matrix as monoparticles.

1. www.ssnano.com
2. T. Seghier, F. Benabed, International Journal of Materials, Mechanics and Manufacturing, Vol. 3, No. 2, (2015).
3. A. Medjdoub, A. Boubakeur, T. Lebey, Proc. Annual Report Conference on Electrical Insulation Dielectric Phenomena, pp. 517-520 (2008).
4. W.R. Caseri, Mater. Sci. Tech., 22, 807-817 (2006).
5. J. Higgins and A. Maconnachie, "Neutron Scattering from Polymers", Meth. Exp. Phys. 23, 287 (1987).
6. Yu.M. Ostanevich, Makromol.Chem.Macromol.Symp. 15, 91 (1988).
7. D. Franke and D. I. Svergun, J Appl Cryst. 42, 342-346 (2009).

Магнитно-электронное фазовое разделение выше T_c в $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ $x = 0,18; 0,22$ монокристаллах без/с переходом «изолятор – металл»

*В. А. Рыжов, О. П. Смирнов, В. П. Хавронин,
И. А. Киселев, Ю. П. Черненко, В. В. Дериглазов*

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Исследовалось микроскопическое магнитно-электронное фазовое разделение (МЭФР) и T -эволюция образующегося неоднородного магнитного состояния в $x = 0.18, 0.22$ монокристаллах $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ряда без/с И-М переходом, обладающих большим КМС. Изучались линейная и нелинейные (второго и третьего порядка) ac восприимчивости, структура и транспортные свойства. Согласно нейтронной дифракции их структура соответствует орторомбической ($Pbnt$ пространственная группа). Транспортные свойства характеризуются И поведением с особенностью вблизи $T_c = 175(1)$ К в $x = 0.18$ составе и И-М переходом при $T_{\text{ИМ}} = 201$ К $> T_c = 186(1)$ К в $x = 0.22$. Измерения полевых зависимостей второй гармоники, $M_2(H)$, отклика на слабое ac поле $h \cdot \cos 2\pi ft$ ($f = 15.7$ МГц) в параллельном ему статическом поле H при разных T свидетельствует об образовании ФМ кластеров ниже $T^* = 236$ и $T^* \geq 280$ К в $x = 0.18, 0.22$ кристаллах соответственно. Оно отслеживается по появлению специфического $M_2(H)$ сигнала с экстремумом в слабом поле и слабым H -гистерезисом. Такой отклик соответствует отклику ансамбля магнитных наночастиц в близком к суперпарамагнитному (СПМ) режиме [1]. Практически одновременно с образованием ФМ кластеров, ФМ критические флуктуации развиваются в Π матрице обоих кристаллов и дают вклад в M_2 с линейной зависимостью от H ($M_2 \sim Hh^2$) без H -гистерезиса. В $\text{La}_{0.82}\text{Ca}_{0.18}\text{MnO}_3$ кластерная подсистема находится в СПМ режиме вплоть до T_c и упорядочивается вместе с матрицей ниже T_c . В $x = 0.22$ манганите резкий рост плотности кластеров до перколяционного предела приводит к И-М переходу при $T_{\text{ИМ}} = 201$ К выше T_c . При приближении к $T_{\text{ИМ}}$ в $M_2(H)$ отклике наблюдается рост H -гистерезиса, а в окрестности $T_{\text{ИМ}}$ - нарушение антисимметричных соотношений $H \rightarrow -H$, $M_2 \rightarrow -M_2$ для M_2 -петель гистерезиса. Ниже $T_{\text{ИМ}}$ при приближении к T_c доминирует сигнал от матрицы и маскирует кластерный вклад, симметричные соотношения в M_2 вновь выполняются. Ниже T_c формируется сложная доменная структура и вновь проявляется нарушение симметричных свойств. Эти особенности ясно указывают на разное критическое поведение подсистем, что свидетельствует о присутствии двух типов ФМ обменных взаимодействий, по крайней мере, в $\text{La}_{0.22}\text{Ca}_{0.78}\text{MnO}_3$.

1. P. V. Kharitonskii, K. G. Gareev et al., Journal of Magnetism 20, 221 (2015).

Магнитная и электронная структуры кубической фазы высокого давления соединения DyGe_{2,85}

*Д. А. Саламатин^{1, 2, 4}, В. А. Сидоров¹, С. Е. Кичанов², Л. Н. Фомичева¹,
А. В. Саламатин², А. И. Величков², А. В. Николаев^{3, 4}, Д. П. Козленко²,
М. Будзинский⁵, А. В. Цвященко^{1, 3}*

¹ *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

⁴ *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия*

⁵ *Institute of Physics, University Maria Curie-Skłodowska, Lublin, Poland*

Поликристаллический образец DyGe_{2,85}, синтезированный при высоком давлении, обладает кубической структурой типа AuCu₃ с пространственной группой Pm-3m и постоянной решетки $a = 4.286(4)$ Å [1].

Такой же кристаллографической структурой обладает соединение TbGe_{2,85} [1], в котором было обнаружено образование волны зарядовой плотности (ВЗП) при температуре ниже 145 К. Магнитные моменты Tb в соединении TbGe_{2,85} упорядочиваются в несоизмеримую антиферромагнитную спираль с волновым вектором $k_{ic} = 2\pi/a(0.5, 0, 0.165)$ при температуре ниже 19 К [2]. Было также показано, что с увеличением внешнего давления в TbGe_{2,85} образуется вторая антиферромагнитная фаза с волновым вектором $k_c = 2\pi/a(0.5, 0, 0)$, а образование ВЗП не наблюдается при давлениях $P > 2.6$ ГПа [3].

Измерения зависимости электрического сопротивления от температуры для DyGe_{2,85} показали, что при $T_{CDW} = 82$ К в соединении наблюдается переход с образованием ВЗП, а температура Нееля $T_N = 22$ К. ВЗП при давлении выше 1.2 ГПа подавляется. Результаты обработки нейтронных дифрактограмм при 4 К показали, что антиферромагнитная структура представляет собой несоизмеримую спираль, аналогично той, что наблюдалась для TbGe_{2,85}. С помощью метода возмущенных угловых гамма-гамма корреляций на пробных ядрах ¹¹¹Cd [4], внедренных в решетку DyGe_{2,85}, были определены квадрупольные и магнитные частоты в диапазоне температуре 4–300 К.

Работа была поддержана грантом Полномочного представителя правительства Республики Польша и РФФИ, грант № 17-02-00064.

1. A. V. Tsvyashchenko, A. I. Velichkov, et al., JALCOM, 552, 190 (2013).

2. A. V. Tsvyashchenko, D. A. Salamatin, et. al., Phys. Rev. B 92, 104426 (2015).

3. D.A. Salamatin, V. A. Sidorov, et. al., Phys. Rev. B 94, 214435 (2016).

4. V.B. Brudanin, D. V. Filossofov, et al., NIM in Phys. Res. A, 547, 389 (2000).

Исследование мезоскопической структуры моногерманидов переходных металлов методом малоуглового рассеяния нейтронов

И. А. Сафиулина^{1, 2}, Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, Е. Г. Яшина^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследована мезоструктура моногерманидов переходных металлов $Mn_{1-x}Co_xGe$ в широком диапазоне концентраций $x = 0.0 - 0.95$. Эти соединения могут быть синтезированы только под высоким давлением [1] и являются метастабильными при атмосферном давлении. Экспериментальные зависимости $I(Q)$, полученные в диапазоне переданных импульсов ($5 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^{-1} < Q < 4 \text{ нм}^{-1}$), аппроксимированы для всего ряда образцов выражением Q^{-n} с показателем $n = 2.99 \pm 0.02$, связанным с фрактальной размерностью системы. Полученная зависимость свидетельствует о том, что надатомная структура образцов характеризуется наличием дефектов с пространственной организацией, описываемой фрактальной моделью с логарифмической зависимостью плотности дефектов от расстояния. Было обнаружено, что в изоструктурном соединении FeGe такие дефекты отсутствуют, а экспериментальные зависимости хорошо описываются выражением Q^{-n} с показателем $n = 4.1 \pm 0.1$, демонстрирующим наличие кристаллитов с однородным распределением плотности внутри него и резкой границей, характеризующей поверхность.

1. A. V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).

Кристаллическое и магнитное состояния композитных мультиферроиков $M\text{Fe}_2\text{O}_4 + \text{BaTiO}_3$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}$)

М. А. Сёмкин^{1, 2}, А. Е. Теплых², А. П. Носов^{1, 2}, А. Н. Пирогов^{1, 2}

¹ Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Проведены нейтронографические измерения композитных мультиферроиков $(M\text{Fe}_2\text{O}_4)_{1-x} + (\text{BaTiO}_3)_x$, где $M = (\text{Co}; \text{Ni})$, $x = (0.2; 0.3; 0.4)$, с целью изучить влияние содержания ферроэлектрика BaTiO_3 на кристаллическое и магнитное состояния ферримагнетиков $M\text{Fe}_2\text{O}_4$.

Композиты представляют собой смесь магнитных $M\text{Fe}_2\text{O}_4$ и пьезоэлектрических частиц BaTiO_3 . Элементарная ячейка феррита кобальта состоит из частично обращенной шпинели (кубическая пространственная группа $Fd-3m$), ионы Co занимают $\sim 23\%$ узлов в тетра- позиции $8a$ и $\sim 38.5\%$ узлов в окта-позиции $16d$, остальные узлы заполняют ионы Fe . Для серии образцов с ферритом никеля, из-за близости величины амплитуды рассеяния нейтронов ионами никеля $b_{\text{Ni}} = 1.03 \cdot 10^{-12}$ см и железа $b_{\text{Fe}} = 0.945 \cdot 10^{-12}$ см, расчет дифрактограмм выполнен с допущением, что ионы Ni занимают половину узлов позиции $16d$, ионы Fe заполняют полностью $8a$ позицию и остальные узлы $16d$ (обращенная шпинель). Титанат бария имеет структуру перовскита, ионы Ba занимают позиции $1b$, ионы Ti – $1a$, а ионы O – $1a$ и $2c$ (тетрагональная группа $P4mm$).

Магнитная структура CoFe_2O_4 (NiFe_2O_4) в композитах с BaTiO_3 описывается волновым вектором $k = 0$. Спины ионов в позиции $8a$ антипараллельны спином в позиции $16d$, их величины приведены в таблице. При увеличении доли ферроэлектрика от 62% до 84% , магнитный момент в позиции $8a$ ионов ферримагнетика CoFe_2O_4 возрастает на 4.6% , в позиции $16d$ – уменьшается на 2.2% , что приводит к уменьшению на 8.8% величины суммарного магнитного момента (μ_{Σ}). Установлено, что увеличение содержания BaTiO_3 от 60% до 80% , приводит к изменениям в магнитном состоянии NiFe_2O_4 , величина μ_A увеличивается на 2.0% , μ_B уменьшается на 3.0% , в результате μ_{Σ} – снижается на 4.7% .

Таблица. Величина магнитных моментов ферримагнитных компонент

Аттестованный состав	μ_A, μ_B	μ_B, μ_B	μ_{Σ}, μ_B
0.16[Co _{0.23} Fe _{0.77}] _A [Co _{0.77} Fe _{1.23}] _B O _{4.08} + 0.84BaTiO _{2.89}	3.84(11)	3.63(9)	3.42(14)
0.23[Co _{0.23} Fe _{0.77}] _A [Co _{0.77} Fe _{1.23}] _B O _{4.02} + 0.77BaTiO _{2.89}	3.80(8)	3.66(7)	3.52(11)
0.38[Co _{0.24} Fe _{0.76}] _A [Co _{0.76} Fe _{1.24}] _B O _{3.90} + 0.62BaTiO _{2.83}	3.67(7)	3.71(5)	3.75(9)
0.20[Fe ₁] _A [Ni ₁ Fe ₁] _B O _{4.29} + 0.80BaTiO _{2.97}	4.08(9)	2.85(6)	1.62(11)
0.30[Fe ₁] _A [Ni ₁ Fe ₁] _B O _{4.16} + 0.70BaTiO _{3.02}	4.04(8)	2.83(5)	1.62(10)
0.40[Fe ₁] _A [Ni ₁ Fe ₁] _B O _{4.14} + 0.60BaTiO _{2.97}	4.00(6)	2.85(4)	1.70(7)

Structure and dynamics of lipid membranes probed by reflectometry and inelastic scattering

B.P. Toperverg

*B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute
of NRC “Kurchatov Institute”, Gatchina, Russia*

During last decade neutron scattering has unambiguously demonstrated its potential as an effective tool to probe intrinsic organization and basic physical properties of lipid membranes at various environmental conditions. A sufficient and variable scattering contrast makes neutron reflectometry, off-specular scattering and GISANS, as well as neutron and X-ray spectroscopy, suitable to study tiny structural details, phase transitions and excitation spectrum [1] of lipid bi-layers self-assembled into planar periodic heterostructures on a solid substrate, or even a single lipid membrane near its equilibrium with aqueous medium [2]. Latest results and developments related to e.g. the membrane interaction with proteins, peptides and, especially, foreign agents, such as magnetic nano-particles, are briefly reviewed. Further perspectives and challenges for neutron scattering applications in the field are outlined.

1. M. Zhernenkov, D. Bolmatov, D. Soloviov, K. Zhernenkov, B. P. Toperverg, A. Cunsolo¹, A. Bosak, Y.Q. Cai, Nature Comm., 7, 11575 (2016).
2. M.S. Jablin, M. Zhernenkov, B.P. Toperverg, M. Dubey, H.L. Smith, A. Vidyasagar, R. Toomey, A.J. Hurd, J. Majewski, Phys.Rev.Letters **106**, 138101 (2011).

О возможности наблюдения эффекта аномального пропускания нейтронов при преимущественно резонансном поглощении на совершенных кристаллах InSb

А. Н. Тюлюсов^{1, 2}, Д. В. Львов^{1, 2}, Н. О. Елютин¹

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

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

Первые попытки наблюдать эффект аномального пропускания в дифракции тепловых нейтронов были сделаны Ноулсом в 1956 году на кристалле кальцита CaCO₃, и Зиппелем в 1964 году на кристаллах InSb. Предпосылкой было то, что ещё в 1947 году Гольдбергер и Зейтц показали глубокую аналогию в процессах динамической дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов на совершенных кристаллах. Теоретический анализ эффекта аномального пропускания для случая рассеяния в геометрии Лауэ был проведен в 1965 году Каганом и Афанасьевым, в силу чего получил название «Нейтронно-оптический эффект Кагана-Афанасьева». Впоследствии, экспериментально исследовался Соменковым и Шильштейном с использованием кристаллов CdS в конце 60-х – начале 70-х годов.

Однако, совершенно очевидно, что за прошедшее время совершенствовалась техника эксперимента и методы выращивания кристаллов, что дает возможность проводить изучение эффекта аномального пропускания на новом уровне. Кроме того, несомненную пользу может принести использование опыта, накопленного в рентгеновской кристаллооптике, где эффект аномального пропускания рентгеновских лучей, обычно называемый эффектом Борманна, гораздо подробнее изучен, чем нейтронный случай. Более того, регистрация вторичного излучения при динамической дифракции рентгеновских лучей стала методом исследования неорганических материалов.

В качестве опыта, развивающих данное направление, предлагается изучение эффекта аномального пропускания нейтронов при дифракции на совершенном кристалле InSb в схеме двухкристального спектрометра, при одновременной регистрации прошедшего и отраженного пучков нейтронов, а также гамма-квантов, как вторичного излучения, обусловленного реакцией нейтронов и ядер.

Приводятся возможные геометрии эксперимента и оценки результатов.

Связь критических флуктуаций и появления А-фазы в MnSi

Н. М. Чубова¹, В. А. Дядькин^{1, 2}, Ch. Dewhurst³, С. В. Григорьев^{1, 4}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, Grenoble, France*

³ *Институт им. Лауэ – Ланжевена, Гренобль, Франция*

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

Методом малоугловой дифракции нейтронов детально изучена область (H - T) фазовой диаграммы вблизи критической температуры T_C кубического геликоидального магнетика MnSi [1]. Исследования проводились с приложением магнитного поля \mathbf{H} вдоль кристаллографической оси [111]. Геометрия эксперимента специально выбрана таким образом, где одновременно наблюдается три различных магнитных состояния системы: (а) критические флуктуации спиновой спирали со случайной ориентацией волнового вектора \mathbf{k}_f , (б) коническая структура с $\mathbf{k}_c \parallel \mathbf{H}$ и (в) гексагональная скирмионная решетка с $\mathbf{k}_h \perp \mathbf{H}$. Покажем, что оба состояния (коническая структура и скирмионная решетка) могут наблюдаться выше критической температуры $T_C = 29$ К на фоне критических флуктуаций спиновой спирали. Коническая решетка может быть прослежена вплоть до температур, где длина корреляции ξ составляет порядка периода спирали d_s . Скирмионная решетка локализована вблизи T_C и связана с флуктуациями спирали с корреляционной длиной $\xi_s \approx 2d_s$, а вектор распространения перпендикулярен полю $\mathbf{k}_h \perp \mathbf{H}$. Мы полагаем, что эти спиральные флуктуации можно рассматривать как дефекты формирования и стабилизации скирмионной решетки.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 14-22-01073-офи_м).

1. S. V. Grigoriev, N. M. Potapova et al., JETP Letter, **100**, 3, 2014.

Изменение доменной структуры при ориентационном переходе в ферримагнетике Tm_2Fe_{17}

*М. Н. Шушунов¹, В. П. Глазков¹, В. И. Воронин²,
Э. З. Валиев², А. Г. Кучин², С. П. Платонов²*

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

² *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Экспериментально и теоретически исследовано изменение доменной структуры при ориентационных переходах в различных классах магнетиков (сильных и слабых ферромагнетиках, ферримагнетиках) и показано, что при таких типах переходов должна происходить зависящая от магнитной структуры фрагментация или огрубление структуры доменов. На примере ферримагнетика Tm_2Fe_{17} в котором реализуется ориентационный переход типа «легкая ось – легкая плоскость», обусловленный упорядочением редкоземельной решетки с помощью нейтронного спектрометра СТОИК проведено изучение ультрамалоуглового рассеяния при изменении температуры и магнитного поля. Установлено уширение кривой ультрамалоуглового рассеяния при фазовом переходе, свидетельствующее об уменьшении размера доменов при увеличении магнитного поля, доказывающее магнитный характер рассеяния. Определены размеры доменов. Полученные результаты показывают возможность использования ультрамалоуглового рассеяния как для диагностики, так и для выяснения природы ориентационных переходов в ферромагнетиках.

Работа частично выполнена с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Поток», № 01201463334) и поддержки РНФ (проект № 15-12-10015).

Резонансная дифракция синхротронного излучения в кристаллах семейства KDP

*К. А. Акимова¹, Е. Н. Овчинникова¹, G. Beutier², S.P. Collins³,
G. Nisbet³, C. Richter⁴, D.V. Novikov⁵, Е. Х. Мухамедзянов⁶,
А. П. Орешко¹, В. Е. Дмитриенко⁷*

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Univ. Grenoble Alpes, SIMAP, Grenoble, France*

³ *Diamond Light Source, Harwell Science & Innovation Campus, Didcot,
Oxfordshire, UK*

⁴ *Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany*

⁵ *Deutsches Elektronen-Synchrotron, DESY, Photon Science, Hamburg, Germany*

⁶ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

⁷ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия*

В работе исследована температурная зависимость «запрещенных» отражений, которые возникают при резонансной дифракции синхротронного излучения в кристаллах семейства KDP (RbH_2PO_4 и KH_2PO_4) при энергии падающего излучения, близкой к К-краю рубидия и калия. На синхротронах DESY (Германия) и ESRF (Франция) были измерены энергетические спектры отражений 006, 550 в RDP и 002, 222 в KDP в широком интервале температур, а также спектры поглощения. Экспериментальные исследования показали резкий скачок интенсивности отражений при температурах 147 К (RDP) и 123 К (KDP), соответствующих фазовому переходу из пара- в сегнетоэлектрическую фазу. В параэлектрической фазе интегральная интенсивность обоих рефлексов не падает в соответствии с фактором Дебая-Валлера, а растет. В KDP также наблюдалась перестройка энергетических спектров «запрещенных» отражений с температурой.

Проведено математическое моделирование энергетических спектров «запрещенных» отражений при различных температурах с целью объяснения экспериментальных данных. Показано, что все отражения являются результатом интерференции трех резонансных вкладов в атомный фактор: диполь-квадрольного, термоиндуцированного, а также вклада, обусловленного мгновенными конфигурациями протонов [1, 2].

Учет всех трех вкладов в резонансное рассеяние синхротронного излучения позволяет описать наблюдаемое поведение интегральной интенсивности «запрещенных» отражений в RDP и KDP с температурой, а также определить энергии активации различных мгновенных конфигураций протонов в рамках модели точечных дефектов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-02-00887. Вычисления проводились на суперкомпьютере СКИФ МГУ.

1. G. Beutier, S.P. Collins, G. Nisbet, K.A. Akimova, E.N. Ovchinnikova, A.P. Oreshko, V.E. Dmitrienko. Proton configurations in the hydrogen bonds of KH_2PO_4 as seen by resonant x-ray diffraction. *Physical Review B*. – 2015.
2. C. Richter, D.V. Novikov, E.Kh. Mukhamedzhanov, M.M. Borisov, K.A. Akimova, E.N. Ovchinnikova, A.P. Oreshko, J. Stempfer, M. Zschornak, E. Mehner, D.C. Meyer, V.E. Dmitrienko. Mechanisms of the paraelectric to ferroelectric phase transition in RbH_2PO_4 probed by purely resonant x-ray diffraction. *Physical Review B*. – 2014.

Синтез, особенности кристаллической структуры и потенциальные магнитные свойства $\text{KBi}_4\text{Ni}_2(\text{PO}_4)_3\text{O}_4$

*С. М. Аксенов¹, А. С. Волков², В. С. Миронов¹, Н. А. Ямнова²,
Е. Ю. Боровикова², О. А. Гурбанова², О. В. Димитрова², Д. В. Дейнеко²*

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Большая часть оксосолей висмута кристаллизуется в тройной системе $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{--}M^{2+}\text{O--}X_2\text{O}_5$ (M – переходный элемент; $X = \text{P}, \text{As}, \text{V}$). При этом соединения, содержащие магнитные ионы в высокоспиновом состоянии (Cu^{2+} , Ni^{2+} и т. д.), могут быть потенциальными магнитными материалами.

Методами рентгеноструктурного анализа, ИК- и КР-спектроскопии изучен новый оксофосфат $\text{KBi}_4\text{Ni}_2(\text{PO}_4)_3\text{O}_4$, полученный гидротермальным синтезом в системе $\text{Bi}(\text{OH})_3\text{--NiCO}_3\text{--K}_2\text{CO}_3\text{--K}_3\text{PO}_4$ [1].

Параметры ромбической ячейки: $a = 13.632(1)$, $b = 19.610(2)$, $c = 5.4377(3)$ Å, $V = 1452.64(2)$ Å³, пр. гр.: *Rnma*. Структура расшифрована и уточнена до итогового $R_1 = 5.76$ % в анизотропном приближении с использованием $3606 I > 2\sigma I$. Кристаллическая структура $\text{KBi}_4\text{Ni}_2(\text{PO}_4)_3\text{O}_4$ псевдослоистая: ее основу составляет гофрированный гетерополиэдрический слой состава $\{\text{Ni}_2\text{O}_4(\text{PO}_4)_3\}$, параллельный (100). Вдоль параметра a никель-фосфатный слой чередуется с висмутовым слоем, образованным крупными $\text{Bi}(1-2)\text{O}_7$ -полиэдрами. Атомы калия располагаются в крупных KO_8 -полиэдрах, которые находятся между висмутовыми и никель-фосфатными слоями. Присутствие калия является причиной волнообразного изгиба последних.

Расчеты параметров J обменного взаимодействия $-JS_iS_j$ для обменно-связанных пар Ni-Ni проведены в рамках многоэлектронной теории суперобменного взаимодействия. Электронная структура отдельных ионов Ni^{2+} рассчитана методом теории поля лигандов в комбинации в приближении углового перекрывания. Расчеты показали, что все обменные взаимодействия в $\text{KBi}_4\text{Ni}_2(\text{PO}_4)_3\text{O}_4$ антиферромагнитны и очень слабы, $J_1 = -0.09$ см⁻¹ и $J_2 = -0.06$ см⁻¹ для обменно-связанных пар Ni-Ni внутри слоев и $J_3 = -0.02$ см⁻¹ для пар между слоями. Малая величина обменных параметров объясняется тем, что магнитные ионы Ni^{2+} связаны друг с другом через длинные трехатомные фрагменты Ni-O-P-O-Ni и Ni-O-Bi-O-Ni мостиковых фосфатных и висмутатных групп, которые являются плохими медиаторами обменного взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов МК-8033.2016.5 и МК-7926.2016.5.

1. Н. А. Ямнова, С. М. Аксенов, В. С. Миронов и др. Кристаллография. 62 (2017) (в печати).

Влияние ограниченной геометрии на коэффициенты анизотропного теплового расширения и параметр порядка NaNO_2

О. А. Алексеева¹, А. А. Набережнов^{2, 1}, Д. Ю. Чернышев^{3, 1}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

В данной работе приведены результаты дифракционного исследования температурной эволюции кристаллической структуры нанокompозитов на основе NaNO_2 , введенного в пористое стекло со средним диаметром пор 20 (НКМ-20) и 46 (НКМ-46) нм. Измерения проведены на станции BM01 (ESRF, Франция).

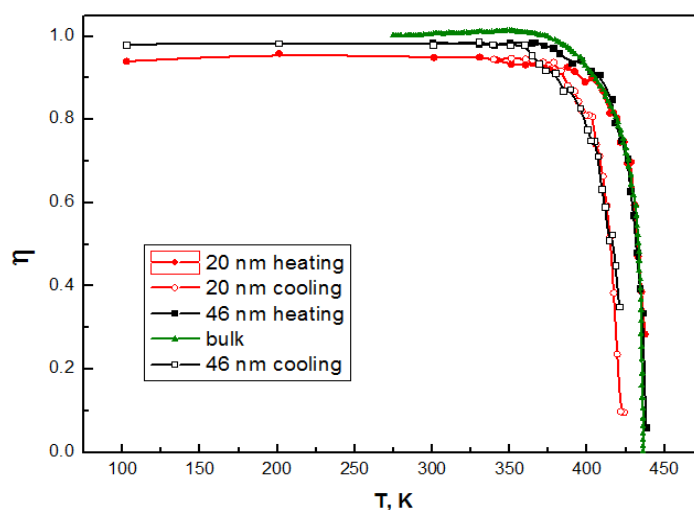


Рис. 1. Температурные зависимости параметра порядка $\eta(T)$ NaNO_2 в нанопористом стекле со средним размером пор 20 и 46 нм при нагреве и охлаждении, а также массивного NaNO_2

Были получены температурные зависимости сегнетоэлектрического параметра порядка $\eta(T)$ NaNO_2 для НКМ-20 и НКМ-46 при нагреве и охлаждении, а также для массивного NaNO_2 . Наблюдается значительный температурный гистерезис (~ 10 К), величина которого сравнима с гистерезисом NaNO_2 , внедренного в искусственные опалы [3]. Изменения рода сегнетоэлектрического фазового перехода с первого на второй, как например для NaNO_2 , внедренного в пористое стекло со средним диаметром пор 3 и 7 нм [4, 5], не происходит. При низких температурах значение параметра порядка в нанокompозитах не достигает единицы (для НКМ-20 его значение составляет 0.94, для НКМ-46 – 0.98). Это может быть связано с разупорядочением в поверхностном слое наночастиц NaNO_2 . Из среднего диаметра пор можно оценить толщину поверхностного цилиндрического слоя наночастиц, в котором отсутствует дальний порядок. Для НКМ-20 эта толщина составляет примерно 6 ± 1 А, для НКМ-46 – 5 ± 1 А.

Получены температурные зависимости параметров ячейки (рис. 2). Обнаружено, что при охлаждении ячейка расширяется в направлениях [100] и [010] и уменьшается в направлении [001]. В целом происходит увеличение объема элементарной ячейки. Рассчитан коэффициент теплового расширения NaNO_2 . Обнаружено, что в обоих нанокompозитах в параэлектрической фазе происходит увеличение КТР (примерно в 2 раза по сравнению с массивным материалом) в направлении [010] при нагреве и уменьшение КТР вдоль [100] и [001] при охлаждении. В сегнетоэлектрической фазе заметного различия значений КТР между нанокompозитами и массивным NaNO_2 не наблюдается.

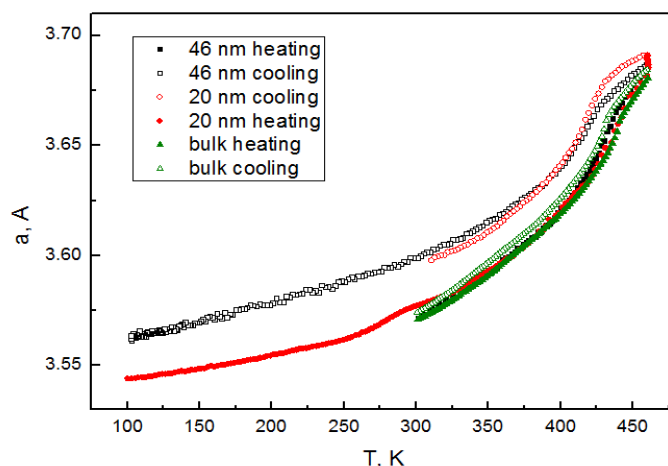


Рис. 2. Температурные зависимости параметра a ячейки NaNO_2 в нанопористом стекле со средним размером пор 20 и 46 нм при нагреве и охлаждении, а также массивного NaNO_2 . Ошибки не превышают размера символов

1. A. Lamas, S.-L. Chang, S. et al., Caticha-Ellis, Phys. State Sol. A. 68, 173 (1981).
2. A. Naberezhnov, A. Fokin et al., Eur. Phys. J. E. 12, 21 (2003).
3. A.I. Bescrovny, S.G. Vasilovskiy et al., Phys Sol. St. 52, 1021 (2010).
4. A.Fokin, Yu. Kumzerov et al., J. Electroceram. 22, 270 (2009).
5. R. Mayoral, J. Requena et al., Adv. Mater. 9, 257 (1997).

Исследование структурно-функциональных комплексов хроматина

*М. И. Арефьев¹, Н. А. Григорьева¹, Н. В. Михайлов¹,
А. М. Поляничко¹, А. В. Рогачев², А. Round³*

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ European Molecular Biology Laboratory, EMBL Grenoble Outstation, France

Хроматин представляет собой достаточно сложную совокупность ДНК, большого числа белков и разнообразных низкомолекулярных лигандов, функционирующих в клеточном ядре. В качестве функциональных элементов хроматина, как правило, выступают специализированные ДНК-белковые и белок-белковые комплексы, состоящие из десятков отдельных молекул. Наиболее распространенными архитектурными белками хроматина являются белки семейства HMGB и линкерный гистон H1. Мишенью связывания для обоих белков служит линкерный участок ДНК, однако до сих пор остается малоизученным вопрос о взаимодействии этих белков между собой [1]. Исследование растворов HMGB1 и гистона H1 при физиологических условиях проводилось методом малоуглового рассеяния синхротронного излучения (SAXS) (рис.). Для каждого из исследованных белков была получена серия кривых при разной концентрации. Результаты анализа этих кривых указывают на наличие существенной агрегации исследуемых белков даже при незначительной концентрации.

В результате анализа кривых малоуглового рассеяния были получены значения радиусов гирации белков и фрактальные размерности их агрегатов. Полученные данные будут использованы в моделировании комплекса HMGB1 / H1 белков методом молекулярной динамики, чтобы достоверно ответить на вопрос, возможно ли существование таких комплексов.

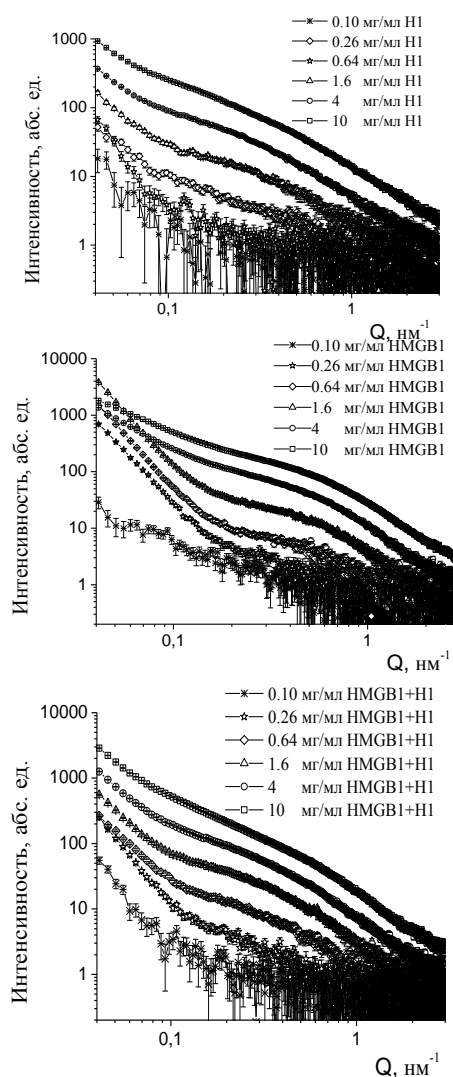


Рис. Зависимость интенсивности синхротронного рассеяния от величины переданного импульса

1. Zlatanova, J. and K. van Holde, Bioessays, 1998. 20 (7): p. 584-8.

Структура и оптические свойства пленок пористого анодного оксида алюминия на стекле и ИТО

*А. Н. Бельтюков, Е. В. Сташкова, Р. Г. Валеев, А. И. Чукавин,
И. А. Елькин, Т. С. Картапова, В. М. Ветошкин, А. С. Алалыкин*

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Анодный оксид алюминия (АОА) обладает уникальной пористой структурой, что позволяет использовать его в качестве темплата для синтеза различных наноструктур [1–3]. Наиболее широко применяемым методом синтеза матриц АОА является одно или двухстадийное анодное окисление алюминиевых фольг высокой чистоты (99,999 %) в электролитах на основе щавелевой, серной и фосфорной кислот при постоянном напряжении [4]. Однако более технологичным для применения в области электроники и оптоэлектроники является окисление тонких пленок алюминия, выращенных на различных подложках.

В настоящей работе пленки алюминия были получены методом вакуумного термического напыления на стеклянных подложках и на стеклянных подложках со слоем ИТО (indium tin oxide). Анодирование пленок алюминия проводилось в растворах щавелевой кислоты с различной молярной концентрацией и при различных напряжениях. Морфология полученных пленок АОА исследовалась методом сканирующей электронной микроскопии. Показано, что параметры пористой структуры не зависят от концентрации раствора, тогда как изменение напряжения анодирования в сторону увеличения приводит к увеличению диаметров пор в синтезируемых пленках. Рентгенодифракционные исследования показали, что пленки оксида алюминия аморфные, тогда как исходные пленки алюминия имеют кристаллическую структуру. Фотoluminesцентные исследования показали наличие широкой полосы излучения с максимумом около 400 нм, связанной с кислородными дефектами в структуре оксида. Интенсивность излучения и, соответственно, концентрация дефектов зависит от параметров пористой структуры.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 16-48-180303).

1. L. Zaraska, G. D. Sulka, and M. Jaskuła, “Fabrication of free-standing copper foils covered with highly-ordered copper nanowire arrays”, *Appl. Surf. Sc.*, vol. 258, no. 19, pp. 7781–7786, 2012.
2. Y. Yu, K. Kant, J. G. Shapter, J. Addai-Mensah, and D. Losic, “Gold nanotube membranes have catalytic properties”, *Microporous and Mesoporous Mat.*, vol. 153, pp. 131–136, 2012.
3. R. Valeev, E. Romanov, A. Beltukov, V. Mukhgalin, I. Roslyakov, and A. Eliseev, “Structure and luminescence characteristics of ZnS nanodot array in porous anodic aluminum oxide”, *PSS C* (2012) V. 9 pp. 1462-1465.
4. G.E.J. Poinern, N. Ali, D. Fawcett. *Materials* 4 (2011) 487-526.

Фазовые переходы в керамических материалах на основе церата бария

Е. А. Булаева, Ю. А. Луцицкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Среди высокотемпературных протонных твердых электролитов наибольшей проводимостью по водороду обладают оксидные соединения со структурой типа перовскита. Наиболее известные из них – керамические материалы на основе церата бария BaCeO_3 , представляющие особый интерес в плане фундаментальных исследований природы фазовых переходов и их влияния на электрофизические свойства твердых электролитов. Повышенное внимание к церату бария и его допированным производным обусловлено еще и перспективами практического применения таких соединений в качестве протонных проводников в топливных элементах, электролизерах для получения водорода, а также сенсорах на влагу и водород. Однако, имеющиеся в литературе сведения о фазовых переходах в цератах бария, крайне противоречивы.

В настоящей работе исследованы особенности образования твердых растворов $\text{BaCe}_{0.9}\text{Me}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (Me^{3+} - Y, Pr, Nd, Sm, Gd), имеющих структуру типа перовскита, а также изучено влияние легирующих добавок на температуру фазовых переходов в керамических материалах на основе церата бария.

Образцы получали по стандартной твердофазной технологии из исходных BaCO_3 , CeO_2 , Me_2O_3 при стадийном повышении температуры в интервале 673 – 1373 К и многократных перетираниях.

Рентгенофазовый анализ термообработанных смесей проводили после каждой изотермической выдержки на дифрактометре ДРОН-3 ($\text{CuK}\alpha_1$ - излучение). Кристаллическую структуру образцов уточняли методом Ритвельда с использованием программного комплекса GSAS.

В [1] сообщалось, что соединение церата бария претерпевает ряд структурных превращений в интервале температур 300–1300 К, связанных с изменением симметрии кристаллической решетки. В работах [1, 2] было показано, что фазовые переходы оказывают существенное влияние на транспортные свойства.

В данной работе для керамических образцов состава $\text{BaCe}_{0.9}\text{Me}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ исследованы температурные зависимости линейного расширения и определены температуры особых точек, в которых наблюдались структурные изменения симметрии кристаллической решетки.

1. A. V. Kuzmin, V. P. Gorelov, et al., Solid State Ionics. 162 – 163 (2003).
2. А. В. Кузьмин, В. П. Горелов, Н. В. Шарова и др., Электрохимия. 39, 5 (2003).

Изучение влияния термической обработки на биметаллические наночастицы PtCu/C методом малоуглового рентгеновского рассеяния

*Н. В. Булат, Л. А. Авакян, В. В. Прядченко,
В. В. Срабионян, С. В. Беленов, Л. А. Бугаев*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Катализаторы, основанные на наночастицах платины, широко используются во многих важных с практической точки зрения реакциях, включая реакцию электроокисления водорода в низкотемпературных топливных элементах [1]. Путем формирования биметаллических Pt-M наночастиц со структурой ядро-оболочка возможно уменьшить цену электрокатализатора, а также повысить его стабильность в протекающей реакции [2]. Экспериментальные данные малоуглового рентгеновского рассеяния были получены на синхротроне BESSY-II (Берлин, Германия). Структурное разрешение метода находится в области от 1 до 10^3 нм, то есть в области надатомной организации объекта. Именно этот уровень разрешения определяет свойства материалов. Информация о структуре наночастиц на атомном и надатомном уровнях важна для установления связи между параметрами синтеза и каталитическими свойствами материала. В частности, представляет интерес распределение по размерам наночастиц, их структура. Изучение распределения по размерам может быть выполнено с помощью подгонки или путём моделирования методом Монте-Карло. Из экспериментальных данных была получена информация о структуре PtCu наночастиц и рассчитана средняя толщина Pt оболочки.

1. K. Kon et al., J. Catal., 304, 63-71 (2013).
2. V.V. Pryadchenko et al., J. Phys. Chem. C, 119, 3217-3227 (2015).
3. J. Haug et al., Nanotechnology, 20, 505705 (2009).

SAXS, WAXS и термические свойства нанокompозитов на основе полимочевины и полиорганосилоксана

И. Б. Глебова, В. В. Уголков, О. А. Шилова

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия

В данной работе были синтезированы и изучены нанокompозиты на основе полимочевины и полидиметилфенилсилоксана (ПДМФС) с разным соотношением компонентов. Эти нанокompозиты могут быть использованы для получения покрытия, защищающего изделия и конструкции из разных материалов (металлов, резины и др.) и обладающего хорошими физико-механическими свойствами: прочностью при растяжении, адгезией, стойкостью в широком диапазоне температур от минус 50 °С до плюс 250 °С и др.

Анализ данных SAXS показал, что для полимочевины характерна одноуровневая фрактальная структура. Добавление ПДМФС (25 массовых %) при комнатной температуре приводит к небольшому повышению фрактальной размерности (от 1.7 до 2.0). Однако в случае формирования этого нанокompозита при 140 °С, образуется двухуровневая фрактальная структура с фрактальными размерностями 3.0 и 4.0.

WAXS кривые свидетельствуют об аморфном характере как компонентов смеси, так и самих смесей. Наблюдается три максимума интенсивности для всех исследуемых образцов. Добавление ПДМФС приводит к менее плотной структуре полимочевины.

Деструкция компонентов и их смесей при повышении температуры проходит в три этапа с различным количеством экзоэффектов до 700 °С. ПДМФС термостабилизирует композиты, сдвигая начало интенсивной деструкции к более высоким температурам и уменьшая потери веса в зависимости от соотношения компонентов.

Сравнительное исследование тонких пленок титаната бария-стронция, синтезированных двумя различными методами

Е. Д. Горьковая¹, А. Г. Разумная¹, А. С. Михейкин^{1, 2}, В. М. Мухортов^{1, 2}

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

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

Сегнетоэлектрические тонкие пленки титаната бария-стронция являются перспективными материалами для создания микроустройств, работающих в оптическом и микроволновом диапазонах. Они обладают такими характеристиками, как низкие диэлектрические потери, настраиваемая диэлектрическая проницаемость, высокие значения коэффициента преломления и электрооптических коэффициентов. Эти пленки могут использоваться в электрооптических модуляторах и переключателях для оптоволоконных линий связи, работающих в гигагерцовом диапазоне.

В данной работе методами рентгеноструктурного анализа и КРС спектроскопии проведено исследование тонких пленок состава $\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{TiO}_3$ (BST04) и $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TiO}_3$ (BST05) на подложке (001)MgO методами ВЧ-катодного осаждения и импульсного лазерного напыления, соответственно. Толщина пленок составляла 600 нм.

С помощью рентгеноструктурного анализа установлено, что при комнатной температуре пленка BST04 с параметрами решетки $c = 0.3967$ нм и $a = 0.3937$ нм тетрагонально искажена ($c/a = 1.008$), а пленка BST05 при комнатной температуре находится в параэлектрической фазе с параметром решетки $a = 0.3967$ нм.

Анализ температурной зависимости спектров КРС показал, что фазовый переход в пленке BST04 наблюдается при температуре ~ 450 К, что на ~ 150 К выше температуры перехода, предсказанной теоретически. В пленке BST05 фазовый переход наблюдается при температуре ~ 300 К, что согласуется с теоретическими фазовыми диаграммами. Признаков других фазовых переходов при более низких температурах не обнаружено. Повышение температуры перехода в пленке BST04 невозможно объяснить только механическими напряжениями на границе пленка-подложка. Предполагается, что дефекты, возникающие на интерфейсе пленки BST04 в процессе синтеза, являются причиной накопления зарядов, и возникновения внутреннего электрического поля, приводящего к наблюдаемым явлениям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-12-00258).

Рентгенофлуоресцентный элементный анализ на синхротронном источнике как метод восстановления исторических текстов

П. В. Гурьева^{1, 2}, А. А. Демкив¹, Е. А. Созонтов¹

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

² *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

Исторические тексты подвергаются различным воздействиям: природное старение, ненадлежащее хранение, преднамеренные воздействия (стирание и переписывание). Подобного рода повреждения часто приводят к трудности или невозможности прочтения исторического текста без использования естественнонаучных методов анализа и реконструкции изображения.

Ранее мы отработали и применили рентгеновскую методику цифровой рентгеновской визуализации фрагмента текста, достаточно хорошо читаемого в видимой области спектра [1].

Главной целью данного исследования является рентгенофлуоресцентное изображение и реконструкция угасших и нечитаемых текстовых фрагментов древних пергаментных рукописей. Диагностика состава чернил была также предметом этого исследования.

В качестве образца использовался фрагмент пергамента из переплета рукописи «Повесть об Иосифе Прекрасном» (*пергамент XI–XV вв., записи чернилами XVI–XVII вв.*), предоставленный для исследования в рамках Соглашения о научном сотрудничестве между НИЦ «Курчатовский институт» и Государственным историческим музеем.

В результате выполненной работы: показана возможность цифровой визуализации фрагментов угасшего и нечитаемого древнего рукописного текста на пергаменте, используя синхротронное излучение при сканировании текста коллимированным синхротронным пучком на станции рентгенофлуоресцентного анализа [2], Курчатовского источника синхротронного излучения [3]. Определен элементный состав используемых древних чернил на основе детектирования и анализа спектров рентгеновского флуоресцентного излучения.

1. П.В. Гурьева, А.А. Демкив, Е.А. Созонтов, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2017, № 1, с. 110–112.

2. A.N. Artemiev, N. Artemiev, A. Dyatlov, et al., Nuclear Instruments & Meth. A **575** (2007) 228-230.

3. <http://www.nrcki.ru/>

Электронная структура соединений висмута по данным рентгеновской спектроскопии поглощения высокого разрешения

*А. В. Захарова^{1, 2}, А. А. Мистонов^{1, 2}, А. П. Чумаков^{2, 3}, Р. П. Ермаков⁴,
Л. Д. Исхакова⁴, А. В. Чумакова², К. О. Квашина³*

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁴ Научный центр волоконной оптики РАН, Москва, Россия

Характерной чертой химии висмута является его способность образовывать соединения с разными степенями окисления [1, 2]. По этой причине понимание электронной структуры висмутовых центров является важной проблемой для многих неорганических материалов: сверхпроводники, катализаторы, содержащие висмут кристаллы и ряд других. В решении проблемы определения валентного состояния висмута успешно применяется метод рентгеновской спектроскопии поглощения в околокраевой области (XANES-спектроскопия) [3], однако невысокое энергетическое разрешение не позволяет наблюдать тонких особенностей электронной структуры.

В данной работе были исследованы соединения висмута, отличающиеся степенью окисления и локальным окружением висмутовых центров: металлический Bi, α -Bi₂O₃, BiPO₄, Bi₄(GeO₄)₃, NaBiO₃. Экспериментальные XANES-спектры были получены для L₁ и L₃ краёв поглощения висмута методом высоко разрешающего детектирования флуоресцентного излучения (HERFD) [4] на линии ID26 Европейского центра синхротронных исследований.

Теоретический расчёт распределений плотностей незанятых электронных состояний и спектров поглощения производился методом конечных разностей для ближней тонкой структуры в программе FDMNES.

Показано, что экспериментальные результаты хорошо согласуются с теоретическим расчётом, что позволяет получить расширенное представление об особенностях электронной структуры ионов висмута в различных состояниях.

1. HT San, J. Zhou, J. Qui "Recent advances in bismuth activated photonic materials" //Progress in Mat. Sci. 2014. V.64. P.1-72.
2. X. Jiang, L. Su, P.Yu, X. Guo, H. Tang, X. Xu, L. Zheng, H. Li, J.Xu Broadband photoluminescence of Bi₂O₃-GeO₂ binary systems:glass, glass-ceramics and crystals// Laser Phys. 2013. V.23. - P.105812.
3. E.M. Dianov. Amplification in Extended Transmission Bands Using Bismuth-Doped Optical Fibers // J. Lightwave Techn. 2013. V.31. Is.4. P.681-688.
4. K. Kvashnina, A. Scheinost, J. Synchr. Rad. 23, 3, 836-841(2016).

Структурное поведение бицеллярной кристаллизационной системы: малоугловое рассеяние рентгеновских лучей

*А. И. Иваньков^{1, 2, 3}, Т. Н. Муругова^{1, 2}, Д. В. Соловьев^{1, 2, 3}, А. В. Ищенко⁴,
О. О. Волков⁵, А. И. Куклин^{1, 2}, В. И. Горделий^{2, 5, 6}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия

³ Институт проблем безопасности атомных электростанций, Киев, Украина

⁴ Южно-Калифорнийский университет, Лос-Анджелес, США

⁵ Исследовательский центр Юлиха, Юлих, Германия

⁶ Институт структурной биологии, Гренобль, Франция

Одним из методов кристаллизации мембранных белков является кристаллизация в бицеллярных системах: белки помещаются в смесь липидов (или детергентами) с длинными и короткими «хвостами». Однако вопрос об изменениях, происходящих с липидной фазой в процессе кристаллизации остается открытым.

В наших исследованиях мы использовали малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (МУРР). В данном случае невозможно использование стандартных кристаллизационных плашек из-за использования горизонтального пучка. Для устранения данной проблемы мы разработали метод кристаллизации в стеклянных капиллярах.

Образцы состояли из липидной матрицы ДМФХ/ХАПСО и встроенного в нее мембранного белка – бактериородопсина.

Мы обнаружили, что непосредственно перед началом процесса кристаллизации белка в кривых рассеяния появляются пики. Эти пики соответствуют периоду около 85 Å (среднее для нескольких серий кристаллизации). Это расстояние уменьшается на 5–10 Å в процессе формирования кристаллов. Отношение позиций пиков 1 : 2, что может свидетельствовать о наличии ламеллярной фазы.

Также мы наблюдали вторую группу пиков, которые соответствуют расстояниям в 500–600 Å.

При тех же кристаллизационных условиях нами были проведены исследования изменения структурных параметров чистой липидной фазы (без включения мембранного белка) со временем. Обнаружено схожее поведение фазы, как и в случае экспериментов с мембранным белком. В кривых рассеяния наблюдались пики с соотношением позиций 1 : 2 и соответствующие периоду около 75 Å.

Работа поддержана в рамках «Проекта по повышению конкурентоспособности университетов Российской Федерации (Проект 5-100) среди ведущих мировых научно-образовательных центров» МФТИ, а также Молодежных грантов ОИЯИ 2017 для сотрудников с ученой степенью.

Параметрическое рентгеновское излучение в порошках с разным размером зерен

*В. И. Алексеев^{1,2}, А. Н. Елисеев^{1,2}, Э. Ф. Иррибарра³, В. А. Карпов²,
И. А. Кищин^{1,2}, А. С. Клюев¹, А. С. Кубанкин^{1,2}, Р. М. Нажмудинов^{1,2}*

¹ Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия

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

³ Национальная политехническая школа, Кито, Эквадор

В работе представлены результаты экспериментальных исследований параметрического рентгеновского излучения (ПРИ) релятивистских электронов, образующегося в порошках с разным размером зёрен [1, 2].

Эксперименты проводились в Отделе физики высоких энергий ФИАН. В экспериментах использовался пучок электронов с энергией 7 МэВ. Мишени были изготовлены из порошка синтетического алмаза с разными размерами зерен (0.3 ± 0.1 мкм; 6 ± 1 мкм; 42 ± 7 мкм). Измерения спектров ПРИ проводились под углами 150° и 180° относительно направления движения электронов. В ходе экспериментов были зафиксированы рефлексии ПРИ от плоскостей (111) и (220).

В экспериментах зафиксировано влияние размеров зёрен на спектры ПРИ, заключающееся в изменении соотношения выхода сигнала ПРИ от кристаллографических плоскостей (111) и (220) для мишеней с различным размером зёрен. Дополнительно были измерены спектры рентгеновского излучения, образующегося вследствие дифракции широкополосного рентгеновского излучения на тех же мишенях под углом 150° , что позволило сравнить и зафиксировать различия в механизмах дифракции виртуальных (ПРИ) и реальных (дифрагированное рентгеновское излучение) фотонов в порошках.

Так же в работе было выполнено сравнение измеренных спектров ПРИ с теорией, разработанной для поликристаллических сред [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00502 мол_а.

1. M.L. Ter-Mikaelian // High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media (1972).
2. V.G. Baryshevsky, I.D. Feranchuk // Parametric Xrays from ultrarelativistic electrons in a crystal: theory and possibilities of practical utilization // J. Phys. France. 44 (1983) 913-922.
3. V. Astapenko, N. Nasonov, P. Zhukova // Anomalous peak in the spectrum of polarizational bremsstrahlung from relativistic electrons moving through a solid target // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40 (2007) 1337–1346.

Исследование фазовой диаграммы гафната свинца в пространстве «температура – давление»

*М. А. Князева, Р. Г. Бурковский, Д. А. Андроникова,
Ю. А. Бронвальд, С. Б. Вахрушев, А. В. Филимонов*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия*

Твёрдые растворы антисегнетоэлектриков (АСЭ) с сегнетоэлектриками являются материалами, обладающими рядом полезных свойств [1]. Многие полезные свойства АСЭ связаны со структурными неустойчивостями в этих соединениях, в связи с чем востребовано изучение фазовых переходов в таких кристаллах.

Целью данной работы является получение информации о структуре неизученных промежуточных фаз гафната свинца (PbHfO_3) и уточнение его фазовой диаграммы в пространстве температура–давление. Для достижения поставленной цели был реализован метод дифракции синхротронного излучения на монокристаллах PbHfO_3 при одновременном приложении температуры и давления. Новизна подхода состоит в применении монокристаллической дифракции вместо применявшейся ранее порошковой дифракции [2], а также в одновременном приложении сразу двух термодинамических воздействий. Эксперимент произведён с использованием экспериментального оборудования Европейского синхротронного источника (ESRF) – на линии ID27.

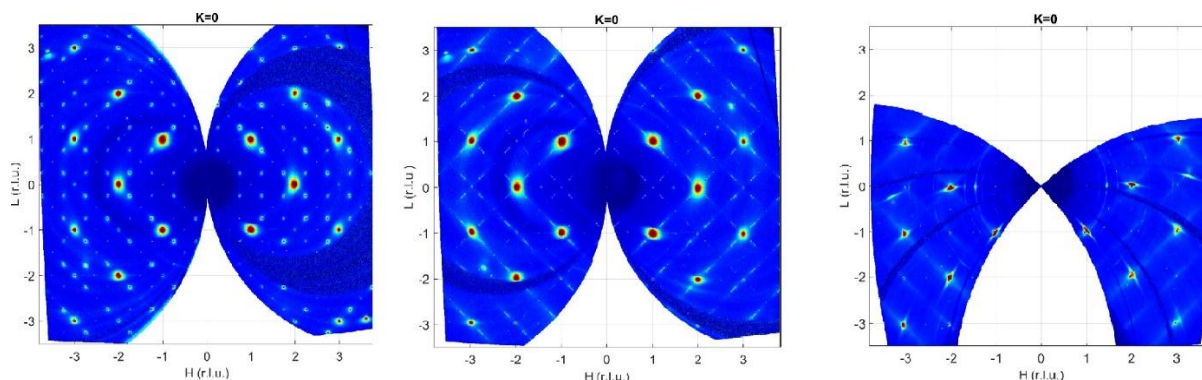


Рис. 1. Реконструкции обратного пространства для различных фаз в PbHfO_3 при температуре 23°C, 202°C и 244°C

В результате эксперимента получены реконструкции обратного пространства для различных фаз PbHfO_3 (рис. 1), а также построена уточнённая фазовая диаграмма PbHfO_3 (рис. 2). Низкотемпературная фаза в PbHfO_3 соответствует подобной фазе в PbZrO_3 , исследованной ранее [3].

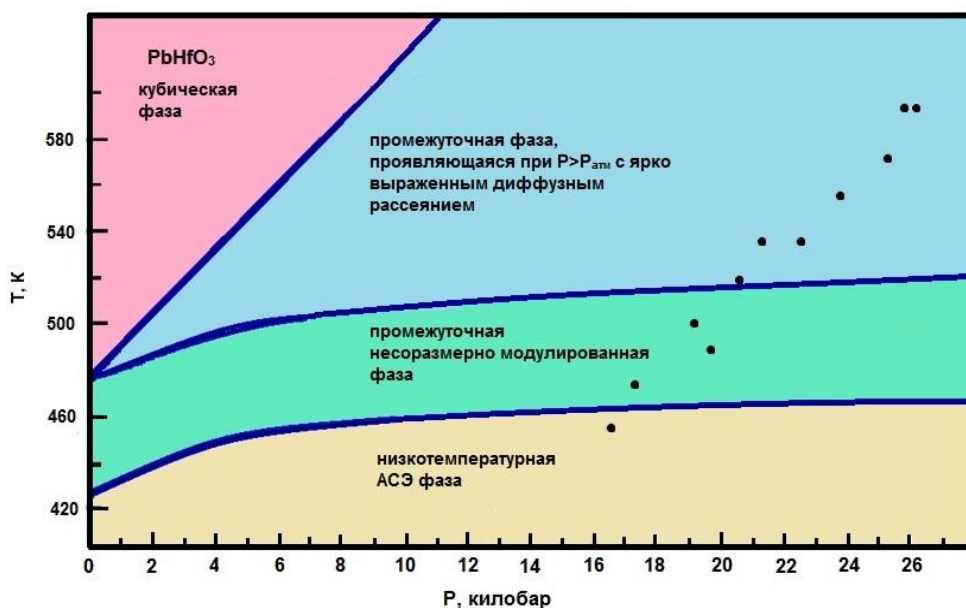


Рис. 2. Уточнённая фазовая диаграмма PbHfO_3 в пространстве температура-давление: область от 0 до 10 kbar была получена ранее [2], точки на диаграмме соответствуют проведённым измерениям

Несоразмерные модуляции в свинцовой подрешётке, появляющиеся при переходе в несоразмерно модулированную фазу, могут быть реализованы с различным периодом модуляции $q \approx 4.55$ r.l.u. и ≈ 5.88 r.l.u. Систематическое погасание рефлексов в М-позициях в высокосимметричном направлении $[h + \frac{1}{2}, 0, h + \frac{1}{2}]$ свидетельствует о повороте кислородных октаэдров [4]. Для фазы, наблюдаемой лишь при отличных от атмосферного давлениях, характерно наличие диффузного рассеяния, отличного по топологии в цирконате свинца в параэлектрической фазе наличием максимумов в точках обратного пространства, расположенных в направлении $[1\ 0\ 1]$.

1. Haertling G. H. Ferroelectric ceramics: history and technology //Journal of the American Ceramic Society. – 1999. – Т. 82. – №. 4. – С. 797-818.
2. G. A. Samara. Pressure and temperature dependence of the dielectric properties and phase transitions of the antiferroelectric perovskites: PbZrO_3 and PbHfO_3 . Phys. Rev. B, 1:3777–3786, May 1970.
3. A. K. Tagantsev, K. Vaideeswaran, S. B. Vakhrushev, A. V. Filimonov, R. G. Burkovsky, A. Shaganov, D. Andronikova, A. I. Rudskoy, A. Q. R. Baron, H. Uchiyama, D. Chernyshov, A. Bosak, Z. Ujma, K. Roleder, A. Majchrowski, J.-H. Ko, and N. Setter. The origin of antiferroelectricity in PbZrO_3 . Nature Communications, 4:2229, 2013.
4. A.M. Glazer. The Classification of Tilted Octahedra in Perovskites. Acta Cryst/ (1972). B28, 3384.

Исследование комплексов родия(III) с аспарагином и гипоксантином посредством XAFS спектроскопии на источнике синхротронного излучения

*М. Н. Курасова¹, Н. Я. Есина¹, А. Л. Тригуб², В. А. Лазаренко²,
Я. В. Зубавичус², В. Н. Хрусталева²*

¹ *Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Синтез, изучение свойств и строения комплексных соединений платиновых металлов с лигандами, содержащими несколько донорных центров (такие как аминокислоты, пуриновые и пиримидиновые основания), занимают важное место в современной координационной химии, так как в зависимости от взаимного расположения нуклеофильных центров в лигандах, электронной конфигурации комплексообразователей и условий синтеза соединений, лиганды проявляют различную дентатность. Это дает возможность получать комплексы, имеющие различный состав, строение и, следовательно, обладающие различными свойствами.

С момента открытия противоопухолевой активности цис-дихлородиаминоплатины(II), синтез соединений платиновой группы основан на принципе подбора модельных биологически активных молекул, характерных для биологических систем.

Съемка XANES и EXAFS спектров синтезированных комплексов проведены на станции «СТМ» курчатовского источника синхротронного излучения. По результатам обработки спектров предложены модели структур изучаемых комплексов.

1. С.И. Орысык. Тез. Докладов XVIII Международная Черняевская Конференция по химии, аналитике и технологии платиновых металлов, Москва, 9-13 октября. - 2006 г. - С. 36-37.

Фазовые переходы в тонких пленках антисегнетоэлектрика PbZrO_3

*Г. А. Литягин, Р. Г. Бурковский, М. А. Князева, Д. А. Андроникова,
Ю. А. Бронвальд, А. В. Филимонов, С. Б. Вахрушев*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия*

Тонкие эпитаксиальные пленки антисегнетоэлектрика PbZrO_3 (PZO) являются перспективными материалами для конденсаторных накопителей энергии и ячеек памяти высокой плотности [1, 2]. В объемных кристаллах PZO при понижении температуры до $T_C \sim 230$ °С происходит структурный фазовый переход из параэлектрической в антисегнетоэлектрическую фазу. В то же время, в тонких пленках PZO, эпитаксиальное напряжение может приводить к стабилизации сегнетоэлектрической фазы при достижении некоторой критической толщины пленки (~ 20 нм) [3]. В текущей работе исследовалось влияние эпитаксиального напряжения на развитие структурных нестабильностей в тонких пленках PZO различной толщины (от 25 нм до 1000 нм). В качестве методики исследования использовалось рассеяние синхротронного излучения. Эксперимент был проведен на Европейском Источнике Синхротронного Излучения (ESRF) на линии ID03, специально оборудованной для исследования тонких пленок.

В результате эксперимента, для каждой пленки были сняты температурные зависимости интегральной интенсивности сверхструктурных рефлексов с координатами $(\frac{1}{4} + h \frac{1}{4} + k \ 1)$ (Σ – сверхструктуры) и $(\frac{1}{2} + h \frac{1}{2} + k \frac{1}{2} + 1)$ (R – сверхструктуры). На рисунке представлены температурные зависимости данных сверхструктур. Черным цветом показаны полученные в работе [4] зависимости для объемного монокристалла PZO, а красным – зависимости, полученные на ID03 для пленки PZO толщиной 50 нм. Как видно из рисунка, для монокристалла характерен резкий рост интенсивности сверхструктурных рефлексов при понижении температуры до T_C , а в случае пленки наблюдается медленное возрастание интенсивности с уменьшением температуры. Уменьшение толщины пленки приводит к более медленному возрастанию интенсивности. Наблюдаемая модификация температурных зависимостей предположительно может быть связана с сосуществованием сегнетоэлектрической и антисегнетоэлектрической фаз. Также не исключена возможность того, что в пленках изменяется род фазового перехода со второго на первый, что совместимо с наблюдаемыми зависимостями.

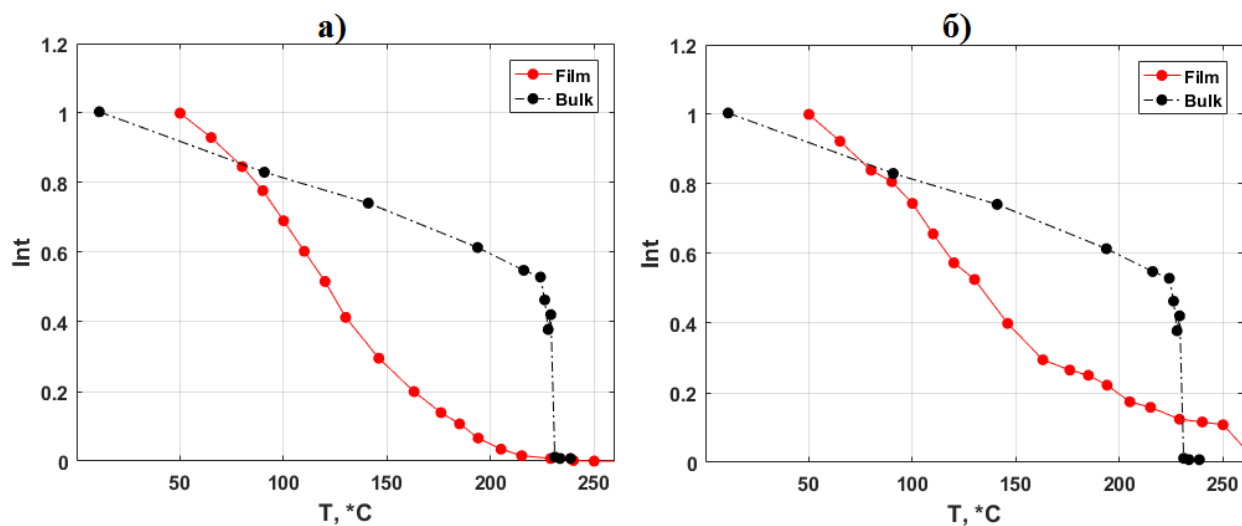


Рис. Температурные зависимости сверхструктур для объемного образца и пленки:
 а) Σ – сверхструктура; б) R – сверхструктура

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-22-00136).

1. J. F. Scott, Applications of modern ferroelectrics, Science 315, 954 (2007).
2. Sharifzadeh Mirshekarloo et al. Large strain and high energy storage density in orthorhombic perovskite $(\text{Pb}_{0.97}\text{La}_{0.02})(\text{Zr}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Ti}_y)\text{O}_3$ antiferroelectric thin films. Applied Physics Letters 97.14 (2010).
3. A. R. Chaudhuri et al., Epitaxial strain stabilization of a ferroelectric phase in PbZrO_3 thin films, Physical Review B, 84, 054112 (2011).
4. H. Fujishita and S. Hoshino. A study of structural phase transitions in antiferroelectric pbzro_3 by neutron diffraction. J. Phys. Soc. Jpn., (1984).

Структурные особенности различных модификаций металл-органических каркасов семейства MIL-53(Al)

А. А. Лобова

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Металл-органические каркасы – Metal Organic Framework (MOF) представляют собой класс многофункциональных пористых соединений и находят своё применение в таких областях как медицина (транспорт медикаментов), хранение и разделение газов, катализ, создание сенсорных устройств и многих других [1].

Целью настоящей работы было определение структурных особенностей различных модификаций MIL-53(Al), допированных родием (~ 5 %), до и после их использования в катализе. Образцы получали в виде мелкокристаллического порошка. Дифрактограммы измеряли на рентгеновском порошковом дифрактометре PANalytical Empyrean, CuK α -излучение.

По результатам фазового анализа в образцах были обнаружены следующие кристаллические фазы: моноклинная (**M**) с параметрами $a = 19.513(2) \text{ \AA}$, $b = 7.612(1) \text{ \AA}$, $c = 6.576(1) \text{ \AA}$, $\beta = 104.24(1)^\circ$, пространственная группа Cc; ромбическая (**P1**) с параметрами $a = 6.6085(9) \text{ \AA}$, $b = 16.675(3) \text{ \AA}$, $c = 12.813(2) \text{ \AA}$, пространственная группа Imma; ромбическая (**P2**) с параметрами $a = 17.129(2) \text{ \AA}$, $b = 6.6284(6) \text{ \AA}$, $c = 12.1816(8) \text{ \AA}$, пространственная группа Pnma.

Кристаллические структуры всех трех фаз известны, что позволило провести многофазное уточнение методом Ритвельда в программе Fullprof [2]. Результаты уточнения показали, что исходный образец содержит три фазы в соотношении **M** : **P1** : **P2** = 1 : 0.1 : 0.4. Образец после использования в качестве катализатора содержит в основном только фазу **P1** (> 95 %).

Преимущественных позиций расположения атомов родия в каркасе Mil-53(Al) не обнаружено.

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ (грант № RFMEFI61616X0069).

1. В. И. Исаева. Гибридные материалы на основе металл-органических каркасов (MOF) и исследование их каталитических и физико-химических свойств. Диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук. Москва, 2016. 373 с.
2. Rodriguez-Carvajal, J. // Physica B. (1993), 192, 55.

Рентгенографические исследования многослойных углеродных нанотрубок

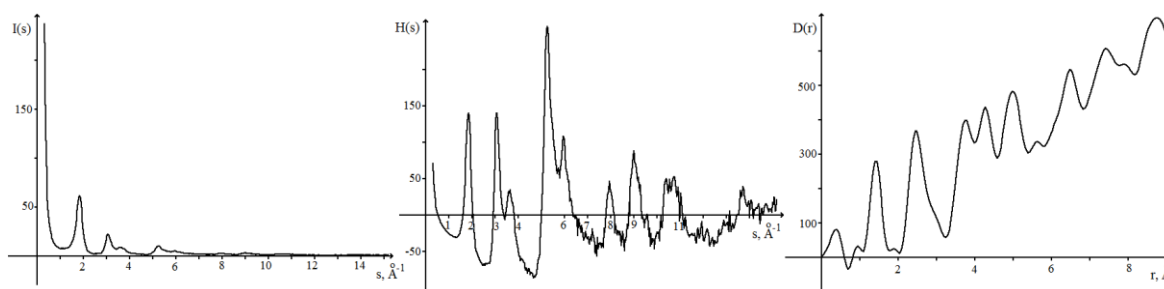
Д. В. Логинов, А. А. Турбанов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

В данной работе, приведены результаты дифракционного эксперимента многослойных углеродных нанотрубок, и проведен анализ рассчитанных значений характеристик ближнего порядка.

Образец многослойных углеродных нанотрубок представлял собой смесь, состоящую из нанотрубок диаметром менее 8 нм и длиной от 10–30 мкм. Содержание углеродных нанотрубок в образце 95 %. Рентгенографирование образцов проводилось на автоматизированном дифрактометре ДРОН-6 в МоК α -излучении в интервале углов от 2 до 145°, в геометрии на просвет.

Методом Уоррена-Финбака из рентгенограммы образца $I(2\theta)$, были рассчитаны кривые $I(s)$, где s – длина дифракционного вектора, исправлены на поглощение, поляризацию, переведены в электронные единицы (эл. ед.) и исправлены на комптоновское рассеяние. Из кривой $I(s)$ были рассчитаны интерференционные функции $H(s)$ и функции парного взаимодействия $D(r)$ [1].



Кривые распределения интенсивности рассеяния $I(s)$ (а), s -взвешенной интерференционной функции $H(s)$ (б), парных функций $D(r)$ (в)

Наличие максимума в области $s = 1.78 \text{ \AA}^{-1}$ подтверждает, наличие в образце многослойных углеродных нанотрубок, а также может свидетельствовать о том, что примесь объемом 5 % по структуре схожа со структурой гексагонального графита. Анализ значений радиусов координационных сфер показал незначительное отклонение от соответствующих данных для гексагонального графита. Но стоит отметить, довольно сильное перераспределение атомов по сферам, как внутри шестичленного кольца, так и на сферах, являющихся межсеточными.

Таким образом, в исследуемом образце примесью являются остатки продуктов синтеза, имеющие структуру гексагонального графита.

1. L. A. Aleshina, V. P. Malinenko et al. // Journal of Non-Crystalline Solids. P. 350, 87 (1986).

Исследование тонких силикатных пленок, содержащих наночастицы Pt и Pd, методом рентгеновской рефлектометрии

В. А. Матвеев¹, Н. Н. Губанова^{2, 1}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Силикатные пленки, легированные наночастицами Pt и Pd, используются в качестве каталитических покрытий в газовых сенсорах и в топливных элементах [1, 2]. Их каталитическая активность напрямую зависит от пористости пленок, структуры и состава силикатных матриц, распределения наночастиц металлов в их объеме [3–6].

В данной работе представлены результаты исследования тонких силикатных пленок, содержащих наночастицы Pt и Pd, полученных путем осаждения из зольей на кремниевые подложки. Исследование слоистой структуры образцов производилось на рентгеновской дифрактометре ДРОН-3М (ПИЯФ, Гатчина, Россия), который был переоборудован для решения рефлектометрических задач.

Анализ данных рентгеновской рефлектометрии показал, что методика золь-гель синтеза позволяет получать очень тонкие (от ~ 4 до 80 нм), силикатные пленки, с малой шероховатостью (в пределах 1–1,5 нм). В образцах, легированных наночастицами платины, наблюдался градиент электронной плотности по их толщине, причем электронная плотность в приповерхностных слоях была заметно выше, чем в нижних слоях. Это свидетельствовало о повышенной концентрации наночастиц Pt вблизи поверхности пленок, что позднее было подтверждено методом обратного резерфордского рассеяния (РОР) [7]. Пленки легированные наночастицами палладия характеризуются более однородным профилем электронной плотности по глубине. Используя данные рефлектометрии и РОР, были получены оценки пористости некоторых образцов.

1. О. А. Шилова, Физика и химия стекла. 31, 2 (2005). С.270-294.
2. О. А. Shilova., J. Sol-Gel Sci. Technol. 68, 3 (2013). P. 387-410.
3. И. В. Петрова, Д. Л. Коваленко, и др., Перспективные материалы. Спец. выпуск: Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества. 11 (2011). С. 342–349.
4. И. Е. Грачева, В. А. Мошников, К. Г. Гареев, Физика и химия стекла. 39, 3 (2013). С. 460-472.
5. И. Е. Кононова, В. А. Мошников, и др., Физика и химия стекла. 40, 2 (2014). С. 244-261.
6. А. А. Popomareva, V. A. Moshnikov et al., Физика и химия стекла. 40, 1 (2014). С. 127-134.
7. О. А. Шилова, Н. Н. Губанова и др., Физика и химия стекла. 42, 1 (2016). С. 112-122.

Определение оптимальных условий генерации рентгеновского излучения при помощи пьезоэлектрического эффекта

К. А. Вохмянина¹, О. О. Иващук¹, В. Ю. Иониди², И. А. Кищин^{1, 3}, А. А. Кленин¹,
А. С. Кубанкин^{1, 3}, М. В. Мишунин¹, Р. М. Нажмудинов^{1, 3}, И. С. Никулин¹,
А. Н. Олейник¹, А. С. Чепурнов^{1, 2}, А. В. Щагин^{1, 4}

¹ Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия

² Научно-исследовательский институт им. Д. В. Скобельцына МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Троицк, Москва, Россия

⁴ Харьковский физико-технический институт, Харьков, Украина

Пьезоэлектрический эффект в монокристаллах ниобата или танталата лития может использоваться для генерации рентгеновского излучения с энергией вплоть до нескольких сотен кэВ [1–3], что позволяет создавать пьезоэлектрические источники рентгеновского излучения [4]. Изменение температуры пьезоэлектрического кристалла на несколько десятков градусов в условиях вакуума (10^{-3} Торр) приводит к электризации поверхностей кристалла, которые пересекает ось спонтанной поляризации кристалла. Образующееся вблизи кристалла сильное электрическое поле способно ионизовать молекулы остаточного газа и вызывать сегнетоэлектрическую электронную эмиссию [5].

В работе представлены результаты экспериментальных исследований зависимости генерации рентгеновского излучения от различных параметров: расстояния между пьезоэлектрическим кристаллом и мишенью, скорости изменения температуры кристалла, состояния поверхности кристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Министерства образования и науки Российской Федерации для высших учебных заведений, проект № 14.578.21.0192 (RFMEFI57816X0192).

1. Brownridge, J. D., “Pyroelectric X-ray generator”, Nature, 358, pp. 277-278 (1992).
2. Geuther, J. A., Danon, Y., “High-energy x-ray production with pyroelectric crystals”, J. Appl. Phys., 97, 104916 (2005).
3. Tornow W., Lynam S. M., Shafroth S. M., “Substantial increase in acceleration potential of pyroelectric crystals”, J. Appl. Phys. 107, 063302 (2010).
4. <http://amptek.com/products/cool-x-pyroelectric-x-ray-generator/>
5. Rosenman, G., Shur, D., Krasik, Ya. E., Dunaevsky, A., “Electron emission from ferroelectrics”, J. Appl. Phys., 88, 6109, (2000).

Влияние рельефа ромбоэдрической плоскости кристаллов сапфира на эпитаксию пленок BiFeO_3

*А. Э. Муслимов¹, А. В. Буташин¹, А. Н. Дерябин¹,
Ш. М. Рамазанов², Н. М. Алиханов², В. М. Каневский¹*

¹ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

Феррит висмута BiFeO_3 (BFO) является наиболее известным мультиферроиком, относится к структурному типу перовскита и при комнатной температуре имеет ромбоэдрически искаженную прототипическую ячейку. Однако, наличие спиральной магнитной структуры препятствует реализации высоких значений намагниченности. Для получения эпитаксиальных пленок BFO обычно применяются подложки (001) SrTiO_3 , близкие по структуре и параметрам решетки. В [1] показано, что, величина критического поля перехода в однородное магнитоупорядоченное состояние связана с дополнительной энергией поверхностной магнитной анизотропии. По оценкам [1], присутствие значительных упругих напряжений на границе раздела BFO-подложка позволит существенно снизить величину критического поля. В нашей работе предложено использование в эпитаксии BFO ромбоэдрической плоскости кристаллов сапфира со стохастическим и упорядоченным нанорельефом. Показано, что текстурированные пленки BFO ромбоэдрической структуры (рис.) можно вырастить термическим нанесением чередующихся слоев толщиной ~ 1 нм Bi, Fe (9–15 слоев) на подложках γ -сапфира с атомно-гладким нанорельефом и дальнейшим отжигом на воздухе при температуре 690–710 °С.

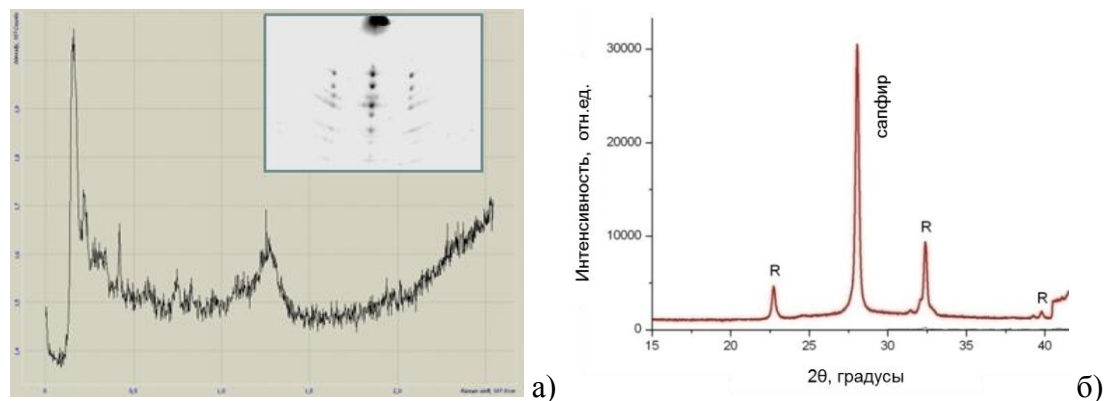


Рис. Спектр комбинационного рассеяния, картины рентгеновской и электронной дифракции от пленки BFO (R-ромбоэдрической структуры) на сапфире

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий».

1. Гареева З. В. и др. Магнитоэлектрический эффект и типы магнитного упорядочения в пленках мультиферроиков // Письма о материалах. 2013. Т. 3. С. 99.

Исследование структуры кремнеземных пленок, содержащих платину и палладий, методом малоуглового рентгеновского рассеяния

П. А. Онущенко^{1, 2}, Н. Н. Губанова², Г. П. Копица²

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

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Платиносодержащие кремнеземные пленки являются альтернативным материалом для топливных элементов водородной энергетики. Методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) исследована структура кремнеземных пленок с различным содержанием оксидов платины и палладия, в зависимости от режимов термообработки. Пленки, содержащие оксиды платины или палладия, получают нанесением из золь. В качестве прекурсора, образующего кремнеземную сетку, использовался тетраэтоксисилан (ТЭОС) [1]. Для получения достаточной интенсивности рассеяния вместо пленок использовались ксерогели. По данным МУРР в диапазоне волновых векторов рассеяния от 0.004 до 0.4 Å⁻¹ получены сведения о размере частиц и фрактальной размерности в зависимости от условий термообработки. Для одного из составов было проверено влияние концентрации ТЭОС на структуру образующихся частиц: при увеличении концентрации ТЭОС в три раза зафиксировано незначительное уменьшение размеров частиц, однако форма кривых в значительной степени подобна. Для всех составов при термообработке наблюдается рост частиц, представляющих из себя кристаллы оксидов платины или палладия в кремнеземной матрице, однако при содержании оксида палладия 3 % рост кристаллов незначителен, что может объясняться малой концентрацией вещества. Полученные данные о структуре, в совокупности с данными по каталитической активности образцов, позволят оптимизировать технологии изготовления соответствующих пленок для достижения искомых каталитических свойств.

1. Шилова О.А., Губанова Н.Н., Матвеев В.А., Байрамуков В.Ю., Кобзев А.П. Физ. и хим. стекла. 1. (2016).

Пендео-эпитаксия ненапряженного слоя AlN на профилированной подложке SiC/Si

А. В. Редьков^{1, 2}, С. А. Кукушкин^{1, 2, 3}, А. В. Осипов^{1, 2, 3}

¹ *Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия*

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

Полупроводники группы III-нитридов и, в частности, эпитаксиальные пленки AlN широко используются для создания мощных электронных, опто-электронных и высокочастотных поверхностно-акустических приборов и в качестве буферных слоев для улучшения структуры пленок нитрида галлия при их гетероэпитаксии на кремниевой подложке. Основной проблемой получения высококачественных слоев AlN и, соответственно, совершенных пленок GaN на кремнии, является образование высокой плотности дислокаций несоответствия на межфазной границе раздела AlN/Si. Для снижения их количества нами впервые был предложен и разработан новый метод пендео-эпитаксии – выращивания упруго-ненапряженных пленок AlN на поверхности буферного слоя карбида кремния (SiC) на кремнии (Si), синтезированного методом замещения атомов [1]. Метод замещения атомов был впервые предложен в 2005–2008 гг. Научные основы данного метода и этапы его развития подробно изложены в обзорах [2, 3].

Для реализации метода пендео-эпитаксии на поверхности Si методом замещения атомов были выращены пленки SiC. Затем методом фотолитографии на поверхности полученного слоя SiC был сформирован двумерный массив колодцев глубиной, не превышающей толщину слоя SiC. Далее, в одном процессе, на подготовленной таким образом подложке и на гладком ее участке методом HVPE был выращен эпитаксиальный слой AlN. Пленки AlN были исследованы методом электронографии на отражение (RHEED), рентгенографии, методом Рамановской спектроскопии и методом растровой микроскопии. Обнаружено, что на профилированной части подложки растет упруго-ненапряженная эпитаксиальная пленка AlN, в то время как на гладкой поверхности подложки упругие напряжения приводят к образованию текстурированного слоя AlN. Предложена модель роста пленки AlN на профилированных подложках SiC/Si, выращенных методом замещения атомов.

1. V.N. Bessolov, D.V. Karpov et al., Thin Solid Films, 74, 606 (2016).

2. S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, J. Phys. D: Appl. Phys. 313001, 47 (2014).

3. С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, Н. А. Феоктистов, ФТТ, 1457, 56 (2014).

Исследование функционально значимых характеристик сверхпроводника Nb₃Sn с помощью резонансной дифракции на синхротронном излучении

*Р. Д. Светогоров¹, Я. В. Зубавичус¹, А. И. Рязанов^{1, 2},
Е. В. Семенов¹, Rene Flukiger³, Luca Bottura³*

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

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

³ *CERN, Geneva, Switzerland*

Синхротронное излучение (СИ) располагает рядом характеристик, которые определяют его более широкие возможности для исследования структурных особенностей различных материалов. Одним из ключевых свойств СИ является широкий спектр, что определяет возможность динамического перестроения длины волны излучения. Таким образом становятся доступны специфические методики исследования, практически недоступные для лабораторных источников рентгеновского излучения. Одной из таких методик является резонансная рентгеновская дифракция (REXD). Метод REXD основан на энергетической зависимости атомного фактора рассеяния вблизи края поглощения одного из элементов, входящих в состав исследуемого соединения. В среде с поглощением атомный фактор имеет следующий вид:

$$f(\theta, \lambda) = f_0(\theta) + f'(\lambda) + i f''(\lambda),$$

где $f'(\lambda)$ и $f''(\lambda)$ – действительная и мнимая части т. н. аномально-дисперсионной поправки. Эти поправки резко изменяются, когда энергия фотона приближается к краю поглощения элемента, в этом случае процессы поглощения и дифракции начинают конкурировать между собой [1].

Одним из интересных применений метода резонансной дифракции может служить определение степени антиузельного разупорядочения в сверхпроводниках типа A15 и, в частности, в Nb₃Sn. Известно [2], что антиузельное разупорядочение является основным дефектом в сверхпроводниках Nb₃Sn и, кроме того, хорошо коррелирует с деградацией сверхпроводящих характеристик. Определение степени такого разупорядочения методами классической дифракции как правило приводит к значительным ошибкам. В рамках данной работы исследовалась применимость метода REXD для решения задач подобного типа, а также определялась степень разупорядочения в Nb₃Sn при облучении быстрыми протонами с энергией 12 и 35 МэВ.

1. Bazin D., Gucci L., and Lynch J. - Anomalous wide angle X-ray scattering (AWAXS) and heterogeneous catalysts - Appl. Cat. A: General – 2002 – V. 226, 1 – p. 87-113.

2. R. D. Blaugher, R. E. Hein, J. E. Cox and R. M. Waterstrat, "Atomic ordering and superconductivity in A-15 compounds", *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 1, no. 6, pp. 539-561, 1969.

Исследование протонпроводящих материалов на основе $(K_{1-x}(NH_4)_x)_mH_n(SO_4)_{(m+n)/2}$

*Е. В. Селезнева¹, И. П. Макарова¹, В. В. Гребенев¹, И. А. Малышкина²,
Н. Д. Гаврилова², В. К. Новик², В. А. Коморников¹, И. С. Тимаков¹*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

С использованием рентгеновского, синхротронного излучений и нейтронов проведены исследования новых монокристаллов твердых растворов, полученных в солевой системе $K_3H(SO_4)_2-(NH_4)_3H(SO_4)_2-H_2O$. Установлено, что использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с различным соотношением приводит к росту кристаллов, отличающихся по структурному типу [1]. При соотношении 3:7 выращенные монокристаллы имеют такой же структурный тип, как и высокотемпературная фаза $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ [2, 3]: кристаллы имеют химическую формулу $(K_{0.43}(NH_4)_{0.57})_3H(SO_4)_2$, пр. гр. $R\bar{3}$, $Z = 3$, $a = b = 5.7768(3)$, $c = 22.0983(1)$ Å, $R/wR = 2.76/4.01$ [4].

По полученным структурным данным установлено, что в составе образцов произошло замещение калия на $\approx 57\%$ аммония. Обнаружено, что в позиции K1 соотношение аммонийных групп и калия равно 1/5 (рис. а), а в позиции K2 – 3/1 (рис. б). Наибольшее количество аммония замещает калий в позиции K2, расположенной между двойными слоями тетраэдров SO_4 , связывая эти слои дополнительными водородными связями, одновременно меняя симметрию координационного окружения катионов и формируя тем самым ось симметрии третьего порядка.

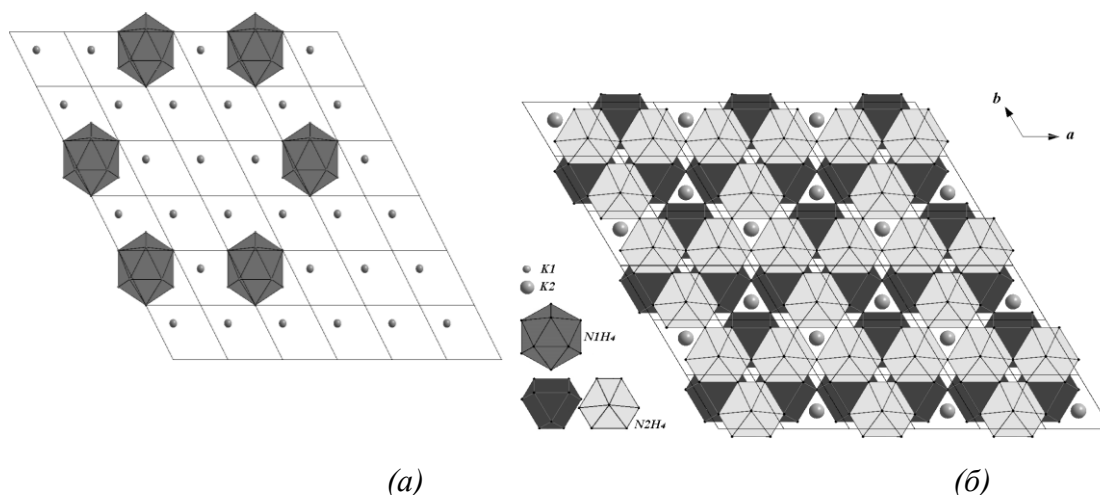


Рис. Основной мотив структуры: показаны атомы калия и группы NH_4 (полиэдры) в двух различных слоях с учетом величины заселенности позиций K1 (а) и K2 (б)

Для выяснения влияния замещения на физические свойства кристаллов при изменении температуры проведены исследования в интервале температур

206–500 К. По результатам исследований оптических и тепловых свойств в интервале температур 295–500 К установлено, что в кристаллах не наблюдается фазовых переходов вплоть до температуры плавления ≈ 470 К. По результатам исследований диэлектрических свойств в интервале температур 206–470 К обнаружено, что уже при комнатной температуре величина проводимости выращенных кристаллов соответствует проводимости исходных соединений при повышенных температурах, а при охлаждении наблюдается аномалия, соответствующая переходу из высокопроводящей в низкопроводящую фазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №16-32-00095 мол_а.

1. Dmitricheva E.V., Makarova I.P. et al., Solid State Ionics 268 (2014).
2. Fukami T., Horiuchi K. et al., Jpn. J. Appl. Phys. Part 1. 35 (1996).
3. Friese K., Aroyo M.I. et al., J. Solid State Chem. 165 (2002).
4. Дмитричева Е.В., Макарова И.П. и др., Кристаллография 60, 6 (2015).

Структурные параметры наносuspензии серебра, полученные методами малоуглового рассеяния рентгеновских лучей

*В. В. Ской^{1, 2}, О. В. Криставчук^{1, 2}, Д. В. Забельский³, Н. Е. Лизунов²,
В. В. Трофимов², Д. В. Соловьев^{2, 3}, А. Н. Нечаев², П. Ю. Апель², А. И. Куклин^{2, 3}*

¹ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия

Серебряные наночастицы находят широкое применение в биологических и медицинских исследованиях. При этом необходимо знание параметров наночастиц: распределение по размерам, поверхностный заряд, наличие агломератов и др.

В работе исследованы суспензии наночастиц серебра, изготовленные методом электрического разряда между серебряными электродами в воде. Суспензии были исследованы на установках Rigaku [1] (МФТИ, Долгопрудный) и BM29 [2] (ESRF, Гренобль, Франция) методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Определены структурные параметры частиц серебра, произведена оценка их формы и степени полидисперсности размеров. Результаты обработки кривых интенсивности рассеянного рентгеновского излучения для нескольких образцов с использованием программ Fitter [3] и SasView [4] показывают, что наибольшую правдоподобность имеют модель шаров с учетом взаимодействия между ними и модель цепочек шаров с учетом полидисперсности их радиусов. Для моделей цепочек шаров получены значения радиусов шаров 8.6 нм, 7.1 нм и 5 нм с полидисперсностью 20 %, 30 % и 50 %, соответственно, для разных проб суспензии.

1. T. N. Murugova, A. V. Vlasov, O. I. Ivankov, et al. J. Optoelectron. Adv. Mater. 17 (2015) 1397–1402.

2. A. Round, E. Brown, R. Marcellin, et al. Acta Crystallogr. Sect. D Biol. Crystallogr. 69 (2013) 2072–2080.

3. <http://yumo.jinr.ru/software/fitter>

4. <http://www.sasview.org/index.html>

Ближний порядок в металлоэпоксисиликатных композитах, синтезированных золь-гель методом

Н. С. Скорицова¹, Д. В. Логинов¹, А. Д. Фофанов¹, Е. Ф. Кудина²

¹ *Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия*

² *Институт механики металлополимерных систем НАН Беларуси, Гомель, Беларусь*

В работе анализируются структурные изменения в ксерогелях на основе жидкого стекла (ЖС, 53 % водный раствор силиката натрия, ГОСТ 13078, силикатный модуль $n = 2,9$; плотность $\rho = 1,45 \text{ г/см}^3$), происходящие в результате их модификации солями меди (CuCl_2 и CuSO_4) и вторым компонентом – олигомером эпоксидной смолы (ЭС).

Анализ атомной структуры проводили методом рентгеноструктурного анализа (дифрактометр ДРОН-4, излучения CuK_α и MoK_α) и с помощью сканирующего электронного микроскопа (Hitachi SU 1510) с микрозондовой приставкой.

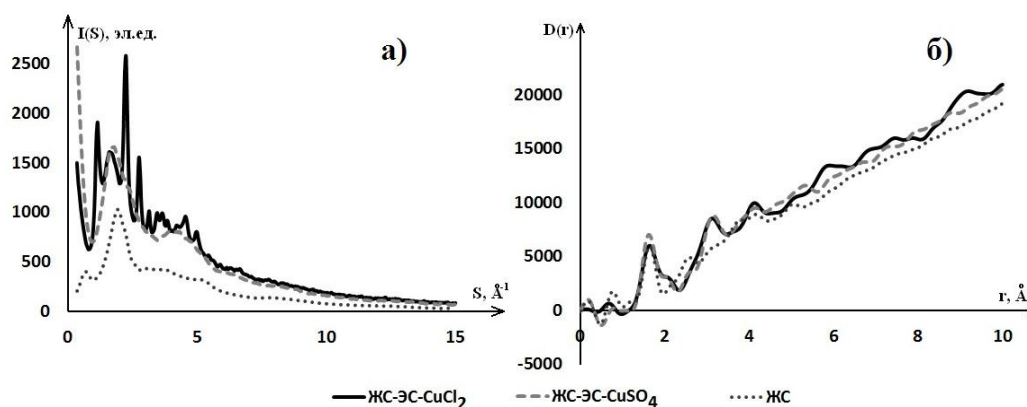


Рис. Кривые $I(s)$ (а) и $D(r)$ (б) для систем ЖС (немодифицированное), ЖС-ЭС- CuCl_2 и ЖС-ЭС- CuSO_4 (время СВЧ воздействия – 2 мин)

Из кривых распределения интенсивности рассеяния $I(s)$ (рис. а) были рассчитаны кривые функций парного взаимодействия $D(r)$ (рис. б), которые затем служили основой для вычисления методом Уоррена-Финбака интегральных (средних по облучаемому объему в эксперименте) характеристик ближнего порядка (координационных чисел, радиусов координационных сфер и их дисперсий). Анализ характеристик показал, что при введении модификаторов кремнекислородные тетраэдры в структуре сохраняются. Различия в интенсивности первого максимума на кривой $D(r)$ при $r \sim 1,62 \text{ \AA}$ для системы ЖС-ЭС- CuSO_4 обусловлены вкладом пар атомов S-O, C-O и C-C, для системы ЖС-ЭС- CuCl_2 – C-O и C-C.

По данным рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии установлено, что катионы натрия в процессе модифицирования ЖС взаимодействуют с анионом соли. Кроме того, показано, что модифицированные образцы являются структурно-неоднородными на субнанометровом и

микронном уровнях. Исследовано влияние времени СВЧ-нагрева, используемого на этапе синтеза для гомогенизации смеси и интенсификации процессов физико-химического взаимодействия, и установлено, что его изменение оказывает воздействие на размеры и характер упаковки неоднородностей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00137 мол_а.

Исследование с помощью синхротронного излучения структурно-фазовых превращений в аморфно-кристаллическом композите Ti-Ni-Cu при мегапластической деформации

*Р. В. Сундеев¹, А. В. Шалимова², А. А. Велигжанин³, Я. В. Зубавичус³,
А. А. Чернышов³, Т. В. Рассадина¹, А. П. Скорлунов¹*

¹ *Московский технологический университет, Москва, Россия*

² *Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии
им. И. П. Бардина, Москва, Россия*

³ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Аморфно-кристаллический сплав $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ испытан в режиме кручения под высоким давлением (КВД) при температурах 77–293 К, при варьировании величины деформации $n = 1/4$ –8 оборотов подвижной наковальни и квазигидростатическом давлении 6 ГПа; скорость вращения подвижной наковальни 1 об/мин. В ходе работы использовалась комбинация дифракционных методов исследования (просвечивающая электронная микроскопия, стандартный рентгеноструктурный анализ и рентгеновская дифракция в синхротронном излучении с пространственным разрешением). Разработано специальное программное обеспечение для предварительного отбора и обработки дифрактограмм – *easyXRDplot.py*, которое позволяет осуществить выделение угловых диапазонов, вычитание фона, экспорт выбранных файлов в обработанном виде для получения функций парных корреляций $G(r)$ на большом массиве экспериментальных данных. Проведены измерения и обработка результатов, полученных с помощью рассматриваемой версии автоматической системы обработки данных. Результаты фазового анализа по данным стандартных рентгеновских исследований и рентгеновской дифракции с пространственным разрешением в синхротронном излучении хорошо согласуются друг с другом. Анализ локальной атомной структуры аморфно-кристаллического сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$, после КВД в различных температурных условиях указывает на различия только в области второй координационной сферы (4–6 Å). Показано, что скорость «растворения» кристаллической фазы в аморфно-кристаллическом $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ в условиях КВД замедляется при 77 К по сравнению с тем же процессом при 293 К.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 15-38-70007 «мол_а_мос».

Изучение структуры и свойств сегнетоэлектрических материалов после механоактивации

*Г. Б. Сухарина¹, В. В. Сташенко², Н. Ю. Смоленцев¹,
Б. К. Абдулвахидов¹, М. А. Фоменко¹, К. Г. Абдулвахидов³*

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

² Научно-исследовательский институт физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

³ Международный исследовательский центр «Интеллектуальные материалы» ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

На основе анализа экспериментальных данных (XANES, SEM, XRD) и многомасштабного компьютерного моделирования структуры сегнетоэлектрических материалов $\text{PbTa}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$, $\text{PbSc}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{Pb}(\text{Zr}_{x-1}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ получены предварительные данные о локальной структуре окружения атомов тантала и свинца в исследуемых образцах после механоактивации. Проведены диэлектрические исследования образцов скандотанталата свинца до и после механообработки. Измерения проведены в температурном диапазоне -100°C - 200°C и частотном диапазоне от 100 Гц до 1 МГц. Определены температуры максимумов диэлектрической проницаемости для образцов до и после механообработки.

Для образцов до механообработки, максимум диэлектрической проницаемости наблюдается при $T \approx 20^\circ\text{K}$. Также наблюдается слабая частотная зависимость максимума диэлектрической проницаемости, что указывает на наличие реакторных свойств. Для образцов после механообработки наблюдается повышение значений $\text{tg}\delta$, что указывает на повышение проводимости. Повышение проводимости вероятно обусловлено ростом числа дефектов, на что также указывает более размытый максимум диэлектрической проницаемости. Кроме того, для образцов полученных методами механосинтеза, наблюдаются большие значения максимумов диэлектрической проницаемости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-32-00589 мол_а.

***In situ* дифракционные исследования с использованием синхротронного излучения термостимулированного распада гидридов в титановом сплаве ВТ6, полученном методами аддитивных технологий**

М. С. Сыртанов, В. Н. Кудияров, Н. С. Пушилина, Д. В. Сиделев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

С активным развитием цифрового производства технологии послойного синтеза становятся все более популярными среди дизайнеров, авиастроителей, а также в медицинском протезировании [1]. Использование таких технологий позволяет ускорить процесс производства изделий, сэкономить металл и получить конструкции со сложной геометрией, которые невозможно изготовить традиционными методами [2]. Проблема водородного охрупчивания в гидридообразующих материалах, таких как титановые сплавы, полученных аддитивными технологиями, по-прежнему остается актуальной. В связи с этим, исследование взаимодействия водорода с материалами, полученными методами аддитивных технологий, имеет не только фундаментальный, но и практический интерес.

В представляемой работе были исследованы образцы литого титанового сплава ВТ6 и сплава, полученного методом электронно-лучевого плавления, предварительно насыщенные водородом из газовой фазы. Структурно-фазовые переходы в системе титан-водород при термостимулированном выходе водорода исследовались *in situ* на станции «Прецизионная дифрактометрия II» Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН. Проведен сравнительный анализ дифракционных картин и данных, полученных из спектров термостимулированной десорбции, с целью выяснения деталей процессов сорбции в титановом сплаве ВТ6, полученном методом электронно-лучевого плавления.

1. B. Berman, Business horizons. 55, 2 (2012).
2. T. Horn, O. Harrysson, Science progress. 95, 3 (2012).

Динамика решетки двух- и трехкомпонентных сегнетоэлектрических сверхрешеток

Ю. А. Тихонов, А. Г. Разумная, И. Н. Захарченко, Ю. И. Юзюк

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Методами рентгеновской дифрактометрии и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) исследованы структурные параметры и особенности динамики кристаллической решетки в двухслойных $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba}_{0.5},\text{Sr}_{0.5})\text{TiO}_3$ (BT/BST) и трехслойных сверхрешетках $\text{BaTiO}_3/(\text{Ba}_{0.5},\text{Sr}_{0.5})\text{TiO}_3/\text{SrTiO}_3$ (BT/BST/ST), выращенных на кубических подложках (001)MgO методом импульсного лазерного осаждения. Определены параметры элементарных ячеек слоев, образующих сверхрешетки и периоды модуляции изученных сверхрешеток. Поляризованные спектры КРС изучены в широком интервале температур 80–700 К.

В спектрах КРС при комнатной температуре обнаружено увеличение частоты мягкой E(TO) моды в трехслойной сверхрешетке по сравнению с двухслойной. Добавление слоя ST приводит к увеличению двумерных напряжений в трехслойной сверхрешетке, и изменяет последовательность фазовых переходов. При исследовании температурных зависимостей спектров КРС обнаружено, что в двухслойной сверхрешетке BT/BST фазовый переход из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую наблюдается при 540 К, а в трехслойной сверхрешетке переход в параэлектрическую фазу существенно сдвинут в область высоких температур ~ 610 К, что связано с деформациями в плоскостях сопряжения между слоями трехслойного образца.

В спектрах двухслойной сверхрешетки BT/BST в субтеррагерцовом диапазоне обнаружен релаксатор дебаевского типа, отсутствующий в спектрах трехслойного образца. Сосуществование центрального пика и мягкой моды в двухслойной сверхрешетке предполагает сложную природу фазовых переходов в слоях, составляющих сверхрешетку, что подтверждается аномальным поведением интенсивности и частоты мягкой моды в этом объекте.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-12-00258).

Исследование фазового состава модифицированного полтитаната калия при различных условиях термообработки

*Э. Э. Хайрзаманова¹, С. И. Саунина¹, Ш. Ш. Ягафаров¹,
А. А. Шиндров², Е. В. Третьяченко², А. В. Гороховский²*

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

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

Методом рентгеноструктурного анализа изучено влияние условий термообработки на фазовый состав полтитаната калия (ПТК) модифицированного в водных растворах сульфата хрома при различных значениях водородного показателя $pH=(7,9)$. Термообработка образцов проводилась на воздухе при температурах 500 и 900 °С и в условиях вакуума при 650, 750, 850 °С.

Фазовый состав образца модифицированного ПТК ($pH = 7$) термообработанного на воздухе при 500 °С представлен фазами TiO_2 (анатаз) и $K_2Ti_6O_{13}$. При дальнейшем увеличении температуры обработки до 900 °С на воздухе основной фазой является $KTi_8O_{16,5}$. Также формируются фазы TiO_2 модификации рутил и анатаз.

На рентгенограммах образца $pH = 7$ после термообработки в условиях вакуума при 650 °С в области углов $2\theta \sim 30^\circ$ наблюдается широкий дифракционный максимум, который по-видимому связан с наложением максимумов нанодисперсных полтитанатов калия. Также присутствуют фазы TiO_2 (анатаз) и $KTi_8O_{16,5}$. Дальнейшее повышение температуры до 750 °С в вакууме ($pH = 7$) приводит к увеличению количества $KTi_8O_{16,5}$, уменьшению полуширины широкого дифракционного максимума в области углов $2\theta \sim 30^\circ$. В образце после термообработки при 850 °С наблюдается увеличение количества фазы $KTi_8O_{16,5}$ и уменьшение фазы TiO_2 (анатаз).

При увеличении значения модифицирующего раствора до $pH = 9$ в образце термообработанном на воздухе при 500 °С формируются фазы TiO_2 (анатаз), K_2CrO_4 , а также фаза малой концентрации $K_2Ti_6O_{13}$. Увеличение температуры обработки до 900 °С приводит к образованию $K_2Ti_6O_{13}$ и $KTi_8O_{16,5}$, которая является основной и характеризуется высокой степенью кристалличности.

После термообработки в вакууме при 650 °С в образце ($pH = 9$) присутствуют фазы TiO_2 (анатаз) и $KTi_8O_{16,5}$. Повышение температуры обработки в вакууме до 750 и 850 °С в образце ($pH = 9$) формируются фазы $KTi_8O_{16,5}$ и $K_2Ti_6O_{13}$, однако содержание последней невелико.

В образцах $pH = 7,9$ при всех температурах обработки в вакууме дифракционные максимумы, характерные фазе рутил отсутствуют.

Микрорентгенофлуоресцентный анализ для криминалистической экспертизы волос

М. Д. Чернецкая, Ф. А. Дарьин, Я. В. Ракиун, Д. С. Сороколетов

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

За рубежом одним из стандартных методов криминалистической экспертизы является рентгенофлуоресцентный анализ (РФА). Методом РФА можно определить содержание очень низких концентраций примесей в образце до 10^{-9} г/г и относительное содержание химических элементов с точностью до нескольких процентов – параметры недоступные для других стандартных методов криминалистической экспертизы. Таким образом, применяя РФА, можно получить дополнительную информацию, полезную для следствия.

Например, в случае наличия луковицы у волоса, обнаруженного на месте преступления, можно провести ДНК-анализ луковицы, и из суженного числа подозреваемых выявить преступника. В случае отсутствия луковицы, современными методами криминалистической экспертизы никакой информации из волоса извлечь невозможно. Однако, известно, что относительное содержание элементов в натуральном волосе сохраняется длительное время [1]. Исследуя это относительное содержание химических элементов можно получить дополнительную информацию, которая будет полезна для следствия.

На экспериментальной станции РФА-СИ накопителя ВЭПП-3 были проведены первые эксперименты по сравнительному анализу нескольких типов образцов волос с высоким пространственным разрешением методами микро-РФА, основанными на применении поликапиллярной оптики.

1. Вагина А.А., Васильева А.А., Забелин А.В., Корнеев В.Н., Кулипанов Г.Н., Ланина Н.Ф. Рентгенодифракционное исследование наноструктурной динамики фибриляционных систем ткани волоса // Известия РАН. Серия физическая, 2015, том 79, №1, с. 84-91.

МУРР-исследования сверхрешетки в сильно легированном пористом фосфиде индия

М. Д. Шарков, М. Е. Бойко, А. М. Бойко, С. Г. Конников

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

Образец-пленка пористого фосфида индия InP с концентрацией легирующих примесей (в основном, серы) около 10^{18} см^{-3} был исследован методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР). Экспериментальные данные были получены на установке МАРС-2 (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) с источником рентгеновского излучения Rigaku 6 kW и на серийном инструменте ДРОН-УМ1, как в режиме отражения, так и просвечивающем режиме, при $\text{Cu K}_{\alpha 1}$ -излучении (длина волны 1.54 Å). В ходе измерения данных МУРР в просвечивающем режиме направление вектора рассеяния пучка варьировалось, и в совокупности кривые МУРР, измеренные точечным детектором, позволили смоделировать 2D-картину рассеяния в малоугловом диапазоне.

Из предварительных измерений рентгеновской дифрактометрии (РД) было установлено, что образец является в целом монокристаллом либо состоит из одинаково ориентированных (когерентных) зерен, причем нормаль к поверхности образца отвечает кристаллографическому направлению (001) решетки InP .

На кривых МУРР, измеренных в просвечивающем режиме при направлениях вектора рассеяния (110) и ($\bar{1}\bar{1}0$), присутствуют интенсивные интерференционные (брэгговские) пики, что вкупе с отсутствием аналогичных пиков для других направлений вектора рассеяния свидетельствует о существовании в образце структуры с 2D- либо 3D-периодичностью (вероятно, сверхрешетки). Периоды сверхструктуры, определяемые по положениям брэгговских пиков, примерно соответствуют 260 нм для направления (110) и 450 нм в направлении ($\bar{1}\bar{1}0$). Модель 2D-картины МУРР обладает C_{2v} -симметрией, что может отвечать двумерной прямоугольной или трехмерной орторомбической сингонии сверхструктуры.

Анализ кривой МУРР, измеренной в режиме отражения, по модели Порода [1] приводит к значениям модуля породовского показателя существенно выше типичных (от 1 до 4), что может объясняться присутствием брэгговского пика, частично расположенного ниже угла полного внешнего отражения (ПВО). Моделирование пика в области углов выше угла ПВО дало оценку периода около 18 нм.

1. O. Glatter, O. Kratky (eds.). Small-Angle X-Ray Scattering. Academic, London, 1982.

Влияние температурной обработки на атомную структуру “core-shell” наночастиц состава PtCu

*Д. Б. Шемет, В. В. Прядченко, В. В. Срабионян,
С. В. Беленов, Л. А. Авакян, В. Е. Гутреман, Л. А. Бугаев*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Композиционные материалы, содержащие наночастицы благородных металлов широко синтезированы и изучены, так как обладают ценными функциональными характеристиками, будучи очень эффективными катализаторами к кислородному электровосстановлению и водородному электроокислению [1, 2]. Нанокатализаторы PtCu / C со структурой ядро-оболочка наночастиц PtCu были синтезированы методом одновременного химического восстановления Cu_2^+ и Pt (IV) в углеродной суспензии, приготовленной на основе этиленгликоля. Характеристика атомной структуры подготовленной как наночастицы PtCu и полученный после термической обработки при различных температурах в диапазоне от 200 до 0° C до 350 0 C, проводили L3- Pt и Cu K-края протяженной тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS) с использованием методики определения локальных параметров структуры поглощающих атомов, которые имеют ближнее окружение, состоящее из атомов Pt и Cu [3, 4]. Спектры были измерены в μSpot BESSY-II (Берлин, Германия).

EXAFS спектроскопия является одним из эффективных методов исследования наночастиц из-за своей чувствительности к локальной атомной структуре и составу, высоким пространственным разрешением и применимости в отсутствии дальнего порядка. В то же время, EXAFS получены значения параметров для ближайших соседей поглощающих атомов в биметаллических наночастицах позволяют сделать только косвенные выводы по атомной структуре изучаемых нанокатализаторов. Для того, чтобы определить связь между синтезом или условий обработки – атомная структура – электрохимические характеристики этих материалов, необходимо визуализировать характер распределения компонентов по объему наночастицы, в соответствии со значениями структурных параметров, полученных из EXAFS.

3D моделирование атомной структуры биметаллических наночастиц в PtCu / C электрокатализаторах проводили имитации атомных кластеров, которые соответствуют значениям локальной атомной структуры атомов Pt и Cu, полученных из EXAFS [5]. Эти модели позволили выявить взаимосвязь между температурой термической обработки и распределения компонентов по объему наночастицах PtCu в исследованных электрокатализаторах.

1. K. Kon et al. // J. Catal., 304, (2013) 63–71.
2. V.V. Pryadchenko et al. // J. Phys. Chem. C, 119, (2015) 3217-3227.
3. V.V. Sraibionyan et al. // J. Non-Cryst. Solids, 382, (2013) 24-31; Poster Session 136 YuMO'16 • 6 – 9 June 2016.
4. V.V. Sraibionyan et al. // J. Phys. Chem. Solids, 75, (2014) 470-476.
5. V.V. Sraibionyan et al. // Physics of the Solid State, 58, (2016) 730.

Магнитокалорический эффект в мультиферроиках-композитах
 $x\text{La}_{0,85}\text{Ag}_{0,15}\text{MnO}_3-(1-x)\text{0.67PNN-0.33PT}$

*Н. З. Абдулкадирова¹, А. А. Амиров¹, В. В. Родионова²,
 К. А. Чичай², В. В. Соколовский³*

¹ *Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия*

² *Научно-технологический парк «Фабрика» Балтийского федерального университета им. И. Канта, Калининград, Россия*

³ *Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

В последние годы мультиферроики – материалы с сосуществованием магнитного, электрического и механического упорядочений рассматриваются в качестве перспективных материалов для твердотельных холодильников, благодаря возможному наблюдению в них магнитокалорического (МКЭ), электрокалорического (ЭКЭ) и эластокорического (ЭКЭ) эффектов. Мультиферроики, в которых наблюдаются два или более калорических эффектов, принято называть мультиколориками и наблюдаемые в них калорические эффекты назвали мультикалорическими. В частности, в мультикалориках за счет взаимодействия электрической и магнитной подсистем возможна взаимосвязь и усиление калорических эффектов вблизи температур фазового перехода. В связи с этим в последнее время ведется поиск материалов с высокими мультикалорическими показателями и околокомнатными температурами переходов.

В рамках решения данной проблемы, были проведены измерения МКЭ косвенным методом мультиферроиков-композитов, состоящих из $0.67\text{Pb}(\text{Ni}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.33\text{PbTiO}_3$ (0.67PNN-0.33PT) релаксорного сегнетоэлектрика и манганита $\text{La}_{0,85}\text{Ag}_{0,15}\text{MnO}_3$. Оба компонента имеют сегнетоэлектрическое (FE) и магнитное упорядочение (FM) вблизи 315 К (для $\text{La}_{0,85}\text{Ag}_{0,15}\text{MnO}_3$ $T_c^{\text{FM}}=310$ К и для 0.67PNN-0.33PT $T_c^{\text{FE}}=320$ К). Композиты $(x)\text{0.67PNN-0.33PT} - (1-x)\text{La}_{0,85}\text{Ag}_{0,15}\text{MnO}_3$ были синтезированы обычным твердофазным методом путем обжига порошков 0.67PNN-0.33PT и $\text{La}_{0,85}\text{Ag}_{0,15}\text{MnO}_3$ при 1413 К, которые предварительно перемешивались и прессовались в определенных соотношениях. Структура полученных композитов исследовалась методами рентгеновской дифракции, а морфология поверхности изучалась на сканирующем электронном микроскопе. Как видно из рисунка на температурной зависимости изменения энтропии

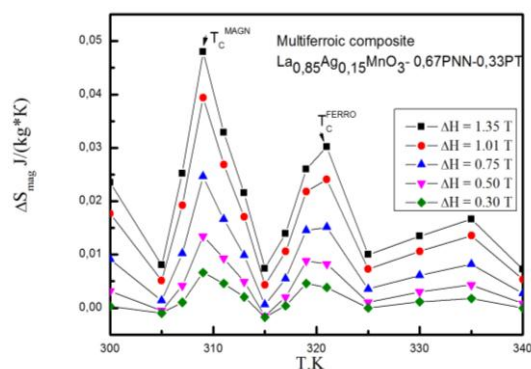


Рис. Температурная зависимость изменения ΔS для состава $x = 0.3$

при изменении энтропии ΔS наблюдаются двойные пики вблизи $T_c^{\text{FM}} = 310 \text{ K}$ и $T_c^{\text{FE}} = 320 \text{ K}$, что подтверждает влияние FE фазы на магнитокалорические свойства в составе с концентрацией. Если первый пик ΔS при $T_c^{\text{FM}} = 310 \text{ K}$ имеет магнитную природу, то вторая аномалия ΔS при $T_c^{\text{FE}} = 320 \text{ K}$ может быть обусловлена механическим давлением FE фазы, которая имеет аномальное тепловое расширение вблизи своей температуры перехода.

Особенности структуры и мессбауэровские спектры мультиферроиков $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$

*А. А. Амиров¹, Д. М. Юсупов¹, Н. З. Абдулкадирова¹,
Y.A. Chaudhary², S.T. Bendre², М. М. Гусейнов¹*

¹ *Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия*

² *Department of Physics, School of Physical Sciences, North Maharashtra University,
Jalgaon, Maharashtra, India*

Несмотря на большое количество работ по исследованию мультиферроиков за последние десять лет, соединения на основе феррита висмута остаются одними из активно исследуемых магнитоэлектрических материалов. Поиск наиболее оптимальных вариантов замещения Bi в BiFeO_3 привел к использованию как немагнитных трехвалентных ионов Cr, Ti, так и двухвалентных допантов Ca, Pb, Sr. Если по влиянию замещения Bi на физические свойства BiFeO_3 , картина более или менее понятна, то относительно исследования BiFeO_3 , в котором замещен ион железа Fe, информация весьма скудна и противоречива. В частности, детальным исследованиям структуры этих соединений не проводилось. С учетом этого в качестве объектов исследования нами были выбраны керамические образцы $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$, в которых трехвалентные ионы Fe^{3+} замещены двухвалентными ионами Zn^{2+} .

Керамические образцы $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15$ и $0,2$) были получены методом жидкофазной реакции из прекурсоров $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, которые были использованы в качестве окислителей, а $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})$ использовался как топливо для сжигания.

Рентгеноструктурный анализ показал, что полученные образцы представляют собой однородную керамику со средним размером гранул 20 нм с присутствием небольшого количества примесной фазы $\text{Bi}_{12}(\text{Bi}_{0,5}\text{Fe}_{0,5})\text{O}_{19,5}$.

Высокотемпературная закалка керамики приводит к появлению дополнительной магнитной примеси по данным рентгеновской дифракции близкой к ZnFe_2O_4 . Полученные мессбауэровские спектры зависят от концентрации добавки x , а для чистого феррита висмута представляет собой суперпозицию двух зеемановских секстетов, обусловленным наличием в его структуре спиновой циклоиды, и двух парамагнитных дублетов, соответствующих примесной железосодержащей фазе.

Self-organization of organic-inorganic hybrid based on TiO₂ nanoparticles

O. Boytsova^{1, 2, 3}, *A.A. Eliseev*³, *V.K. Ivanov*², *A.J. Sutherland*¹

¹ *Aston University, Birmingham, UK*

² *Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry of RAS, Moscow, Russia*

³ *Lomonosov Moscow State University, Russia*

Self-organization in non-classical crystallization is one of the few methods of synthesis of highly-oriented structures called *mesocrystals* (MC) [1]. Non-classical crystallization has more than 100-years history backstage [2], however there is a significant gap in knowledge which has come to the fore in chemistry and material science in present days. MCs comprised of individual nano-sized building blocks often demonstrate close-to-monocrystal structures and corresponding functional properties. Regarding these non-trivial superstructures it is critical to use exotic time-consuming techniques to make a true step forward in understanding MC formation processes in particularly the dynamics of crystallization or MC to MC transformation.

We demonstrate that it is possible to obtain MCs of NH₄TiOF₃ via a non-classical method employing a gel of (NH₄)₂TiF₆ and H₃BO₃ with Brij-surfactant and PEGs templates. The use of Brij-s and PEGs with different molecular weights produced a range of different NH₄TiOF₃ MCs. In-situ Raman spectroscopy and in-situ TGA-MS, during heat treatment, allowed the evolution of NH₄TiOF₃ MCs undergoing transformation into anatase MCs to be followed so shedding light on the dynamics of MC formation. TEM and small-angle X-ray scattering data clearly show well-oriented assemblies of TiO₂ nanoparticles with average sizes of between several and tens of nanometers. Finally, photocatalytic activity of the nascent TiO₂ (anatase) MCs has been demonstrated successfully so showing a potential application of these fascinating materials.

O.B. gratefully acknowledges the support of the European Commission for a Marie Curie Inter-European Fellowship (Grant POLYCOMP no. 661317), RFRB (project #15-38-70045) and RF President Grant (MK-336.2017.3).

1. E. V. Sturm, H. Cölfen, *Chem. Soc. Rev.* 45, 5821-5833 (2016).

2. V. K. Ivanov, P. P. Fedorov, A. Y. Baranchikov and V. V. Osiko, *Russ Chem Rev.* 83, 1204–1222 (2014).

Структура и оптические свойства нанокomпозитов на основе легированного медью и марганцем ZnS, термически осажденного на пористый оксид алюминия

*Р. Г. Валеев¹, А. Л. Тригуб¹, А. Н. Бельтюков¹, А. И. Чукавин¹, И. А. Елькин¹,
Т. С. Картапова¹, О. Р. Бакиева¹, А. С. Алалыкин²*

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия.*

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Пленки пористого оксида алюминия (ПОА), получаемые методом анодного окисления алюминия, получили широкое распространение в качестве мембран в системах очистки газов и жидкостей, матриц и темплатов для создания различных нанокomпозитных материалов, в частности, наноструктуры ZnS, легированные ионами различных химических элементов, которые могут быть использованы в излучающих элементах источников света [1].

Целью настоящей работы является проведение исследований структуры и оптических свойств наночастиц сульфида цинка, легированного медью и марганцем с концентрацией 5 ат. %, осажденных в матрицы пористого Al₂O₃ с диаметрами пор 40, 80 и 120 нм методом одновременного термического осаждения сульфидов цинка и легирующих элементов в условиях сверхвысокого вакуума. Для сравнения использовались пленки материалов, синтезированные вместе с наноструктурами.

Химический состав и характеры химических связей, исследованные методом РФЭС, показали наличие Cu, Mn и Zn, связанных с серой. Послойный химический анализ до глубин около 30 нм показал равномерность распределения легирующих примесей в объеме нанокomпозита. Рентгенофазовый анализ образцов также показал наличие соединений меди, марганца и цинка с серой (Cu_xS, MnS и ZnS, соответственно). Методом EXAFS и XANES-спектроскопии показано, что в образцах сосуществуют фазы Cu_xS различного состава, которые после отжига переходят в фазу Cu₂S. Отдельных частиц меди и марганца не обнаружено.

Исследованы спектры поглощения образцов, полученных осаждением на матрицы ПОА с удаленным алюминием. Выявлена зависимость значений ширины запрещенной зоны от диаметров пор матрицы – с увеличением диаметра значение E_g уменьшается.

Все образцы люминесцируют в видимой области спектра.

Работа выполнялась в рамках проекта РНФ (грант 15-19-10002).

1. X. Fang, T. Zhai et al., Progress in Materials Science 56, 175 (2011).

Разнообразное поведение соединений со структурой B20 на примере теплового расширения FeSi и MnGe

Г. А. Вальковский¹, А. А. Мистонов^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Несмотря на сходный состав, электронные и магнитные свойства соединений переходных металлов FeSi, FeGe, MnGe, MnSi очень разнообразны и чувствительны к малым изменениям параметра решётки. Кроме того, многочисленные исследования до сих пор не могут объяснить с точки зрения локальной картины межатомных связей, почему эти соединения кристаллизуются в довольно низкосимметричную структуру типа B20. Проблема этих исследований в узости подхода, не принимающего во внимание накопленный объём данных по всем таким соединениям.

В настоящей работе изучается аномальное тепловое расширение FeSi с точки зрения как эволюции фононного спектра, так и температурного поведения длин межатомных связей. Проводится сравнение с не менее удивительным тепловым расширением MnGe. Показано, что в обоих случаях при температурном воздействии меняется соотношение длин различных связей между ближайшими соседями Fe-Si (Mn-Ge). Интересно, что при нагреве 80–300 К структура FeSi стремится к идеальной B20, тогда как структура MnGe всё больше от неё отклоняется. Это может быть связано с различием относительного энергетического положения e_g и t_{2g} орбиталей в этих соединениях и вариацией положений этих орбиталей с температурой.

В целом, опираясь как на наши так и на литературные данные, можно предложить следующую цепочку причинно-следственных связей, характерную для соединений со структурой типа B20: воздействие температуры и/или давления и/или изменение состава твёрдого раствора → изменение параметра решётки → изменение степени отклонения структуры от идеальной B20 и кристаллического электрического поля → перестройка электронного спектра → магнитный фазовый переход → изменение проводимости (например, переход металл-изолятор) → электрон-фононное взаимодействие → аномальное тепловое расширение. Для конкретных соединений некоторые звенья в этой цепочке могут отсутствовать.

1. K. V. Shanavas, S. Satpathy, Phys. Rev. B, 93, 195101 (2016).

2. J. Gales, et al., (2015), Phys. Rev. Lett. 115, 036602 (2015).

3. G.A. Valkovskiy, et al., J. Phys. Condes. Matt. 28, 375401 (2016).

Гидротермальный синтез монокристаллов оксобората $\text{CaGdO}(\text{BO}_3)_3$

Ю. А. Васильева

*Национальный исследовательский Московский государственный
строительный университет, Москва, Россия*

Гидротермальный синтез лежит в основе метода выращивания монокристаллов, который заключается в использовании водных растворителей при высоких давлениях (до 300 МПа) и температурах 400–700 °С (673–973 К) для последующего выращивания монокристаллов различных веществ, практически нерастворимых при нормальном давлении в воде и органических растворителях. Снижение температуры процесса уменьшает их растворимость, и вещества выкристаллизовываются из водного раствора.

В работе показано, что оксоборат $\text{CaGdO}(\text{BO}_3)_3$ (GdCOB) является потенциальным материалом для промышленного применения благодаря его оптическим и электрическим характеристикам. Высококачественные монокристаллы GdCOB получены методом вытягивания из расплава по методу Чохральского. Монокристаллы, полученные в лабораторных условиях, характеризуются хорошими оптическими свойствами, не содержат макроскопических дефектов, включений и обесцвечивания.

При исследовании были определены области кристаллизации твердых фаз и состав стабильно кристаллизующихся соединений. Ценность такого рода исследований в возможности широкого поиска получения кристаллов новых соединений, возможно, неизвестного ранее состава, обладающих ценными физическими свойствами.

Наряду с исследованиями по растворимости построение диаграмм служит предварительным этапом при постановке работ по выращиванию крупных монокристаллов, поскольку оно позволяет выявить область кристаллизации, состав сопутствующих фаз, оценить влияние переменных параметров на кристаллизацию данного соединения.

1. Robert Möckel, Margitta Hengst, Christoph Reuther and Jens Götze, Synthesis of $\text{Ca}_4\text{GdO}(\text{BO}_3)_3$ Single Crystals using Czochralski Method, Journal of Siberian Federal University “Engineering & Technologies”.

Электронный транспорт в нанонитях Вi

*А. С. Гончарова¹, О. В. Скрябина², Ю. А. Касумов³, Э. Е. Левин¹,
А. А. Елисеев¹, В. С. Столяров², К. С. Напольский¹*

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

³ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

Интерес к электронному транспорту в анизотропных наноструктурах висмута связан с его уникальными свойствами [1–3]. Одним из необъясненных на сегодняшний день экспериментальных фактов является сверхпроводимость нанонитей Вi при температурах выше 1 К [1, 3]. Однако стоит обратить внимание, что во всех этих работах в качестве метода создания контактов используется фокусированный ионный пучок. Целью данной работы является получение нитевидных наноструктур Вi с контролируемыми размерами и кристаллографической ориентацией и изучение их резистивных характеристик.

Нанонити Вi получали методом темплатного электроосаждения. В качестве пористых матриц выступали пленки анодного оксида алюминия, сформированные в 0,3 М растворе (COOH)₂ при напряжениях 40 и 120 В. Электрохимическое осаждение Вi проводили из электролитов, содержащих 0,1–0,4 моль/л Вi(NO₃)₃ в смеси этиленгликоля с водой (7:3 по объему), при потенциале –0,2 В относительно висмутового электрода сравнения в том же растворе. Электролит деаэрировали аргоном. Ввиду высокой вязкости таких электролитов при осаждении металла возникает омическое падение потенциала, что приводит к тому, что реальный потенциал осаждения Вi отличается от экспериментально задаваемой величины. Измеренные значения сопротивления уменьшаются с 400±10 Ом до 190±5 Ом при увеличении концентрации Вi(NO₃)₃ в диапазоне 0,1–0,4 М.

На основе полученных нанонитей с помощью электронной литографии были сформированы SNS-структуры, где S – тонкопленочный контакт из Nb, а N – единичная Вi нанонить. Температурные зависимости сопротивления для Nb/Vi/Nb-структур в диапазоне 300–1,2 К показали полупроводниковый характер проводимости в полученных нанонитях. В изученных образцах вплоть до 1,2 К переход в сверхпроводящее состояние не наблюдался.

1. M.L. Tian et. al., Nano Lett. 6 (2006) 2773.

2. C. Li et. al., Phys. Rev. B 90 (2014) 245427.

3. M.L. Tian et. al., Nano Lett. 9 (2009) 3196.

Photoinduced hydrophilic behavior of hydrated surfaces of composite films based on TiO₂ and ZnO

A.E. Grishina, M.V. Maevskaya, A.V. Rudakova, A.V. Emeline

Saint Petersburg State University, Russia

The photoinduced superhydrophilicity effect is a surface hydrophilic transition of some metal oxides into superhydrophilic state under UV irradiation. Despite of wide practical application the understanding of mechanisms and reasons yielding the observation or non-observation of this effect on some metal oxide surfaces are still under discussion. It was suggested that reconstruction of hydroxyl-hydrated water multilayer is occurred as a result of the photocarriers trapping [1]. It would be very useful to determine which type of photocarriers, photoholes or/and photoelectrons, rules the photoinduced hydrophilic conversion on the surface of certain material. In turn, knowing this type one can predict and create the surface with proper hydrophilic properties under light. Thereby, the goal of present work is to form the heterojunction structures based on TiO₂ and ZnO and to study the photoinduced hydrophilic transformations for such layer-by-layer films under UV light. Methods of optical tensiometry and the Kelvin probe were used. Alteration of water contact angles on the surface of composite films were also measured at applying of positive and negative potentials. It was found that photoinduced surface hydrophilicity of TiO₂ and ZnO thin films can be dramatically changed by creation of heterostructures.

The present study was performed within the Project "Establishment of the Laboratory "Photoactive Nanocomposite Materials" No. 14.Z50.31.0016 supported by a Mega-grant of the Government of the Russian Federation.

A.E.G. and M.V.M. thank the Russian Foundation for Basic Research for financial support (No. 16-32-00341 mol_a).

1. A.V. Emeline, A.V. Rudakova, M. Sakai, T. Murakami, A. Fujishima, J. Phys. Chem C 117 (2013) 12086.

Тонкие силикатные пленки, содержащие наночастицы платины и палладия

*Н. Н. Губанова^{1, 2}, О. А. Шилова², А. Г. Иванова²,
О. А. Загребельный², П. А. Онущенко^{1, 2}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

В последнее время особый интерес вызывают низкотемпературные топливные элементы (ТЭ) на основе протонпроводящей мембраны, промышленное внедрение которой проблематично из-за высокой стоимости ее компонентов, таких как платиновый катализатор (платиновая чернь) и мембрана “Nafion” (фирма DuPont). Целью данной работы явилась разработка альтернативного материала электрода ТЭ, представляющего собой силикатную матрицу, с пониженным содержанием Pt и Pt/Pd в виде наночастиц.

В качестве прекурсоров использовали: ТЭОС для формирования силикатной матрицы/сетки и гексахлорплатиновую кислоту и/или хлорид палладия для получения легирующих компонентов. Матрицу с наночастицами Pt и/или Pd в виде пленки формировали методом spin-on-glass с последующей фиксацией при температуре 130 и 250 С [1,2] или «нанесением кистью» на углеродную бумагу. Благодаря комплексу взаимодополняющих методов, таких как, рентгеновская рефлектометрия, обратное резерфордское рассеяние, рентгенофазовый анализ, атомно-силовая микроскопия, оптическая, сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия была изучена структура полученных пленок. Микро- и мезоструктуру материалов определяли методами малоуглового рассеяния рентгена и нейтронов. Каталитическую активность наночастиц платины и/или палладия оценивали с помощью вольтамперометрических характеристик.

Исследование показало, что с помощью направленного золь-гель синтеза силикатных пленок, содержащих наночастицы Pt и Pt/Pd, возможно создание новых материалов для ТЭ обладающих каталитическими свойствами. Также удалось оптимизировать состав и структуру активного слоя, уменьшить содержание металлов за счет его равномерного распределения в матрице в виде наночастиц.

1. Шилова О.А., Губанова Н.Н., Матвеев В.А., Байрамуков В.Ю., Кобзев А.П. Состав, структура и морфология поверхности наноразмерных платиносодержащих пленок, получаемых из золь // Физика и химия стекла, 2016, Т.42, №1, с.112-122.
2. Шилова О.А., Губанова Н.Н., Иванова А.Г., Арсентьев М.Ю., Уклеев В.А. Состав и структура тонких композиционных платиносодержащих пленок, полученных из кремнезоль // Журнал неорганической химии, № 5, 2017, в печати.

Получение монокристаллов низкотемпературной модификации AgCuSe , $\text{Ag}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Se}$ и $\text{AgCuSe}_{0.5}(\text{S}, \text{Te})_{0.5}$ методом превращения

*В. К. Гусейнова¹, Ю. И. Алыев^{1, 2}, А. О. Исмайылов²,
Г. Ф. Ганизаде¹, К. М. Джафаров¹*

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Азербайджанский государственный педагогический университет, Баку, Азербайджан*

В лабораторных условиях монокристаллы различных химических соединений выращивают в основном из расплавов или из газовой фазы. Выращенные этими методами кристаллы полиморфных веществ, как правило, принадлежат высокотемпературной модификации. При охлаждении кристалла высокотемпературной модификации ниже температуре превращения внутри кристалла образуются зародыши, и растут низкотемпературной модификации. Монокристалличность низкотемпературной модификации зависит, в основном от, разности плотностей модификаций. По разности плотностей модификации полиморфных веществ можно разделить на три группы: а) $\rho_p > \rho_m$; б) $\rho_p < \rho_m$ и в) $\rho_p = \rho_m$, $\rho_p \leq \rho_m$ и $\rho_p \geq \rho_m$.

В первом и втором случае монокристалл высокотемпературной модификации превращается в поликристалл низкотемпературной модификации, а в третьем случае в зависимости от качества кристалла высокотемпературной модификации получается монокристалл или поликристалл низкотемпературной модификации. Из такого поликристалла при определенных числах превращений можно получить монокристаллы низкотемпературной модификации.

Все указанные составы были синтезированы и методом Бриджмена были выращены их монокристаллы высокотемпературной кубической модификации. Ампулы с монокристаллами высокотемпературной модификации каждого состава при понижении температуры печи ниже температуры полиморфного превращения внутри монокристалла высокотемпературной модификации образовалась зародыши низкотемпературной модификации.

AgCuSe при комнатной температуре кристаллизуется в орторомбической структуре с параметрами решетки $a=4.104 \text{ \AA}$, $b=20.350 \text{ \AA}$, $c=6.310 \text{ \AA}$, $Z=4$, пр.гр. $R4/nmm$, $\rho_x=7.88 \text{ г/см}^3$ и при 504 К превращается в ГЦК модификацию с параметром решетки $a=6.069 \text{ \AA}$, $Z=4$, пр.гр. $Fm3m$, $\rho_x=7.44 \text{ г/см}^3$. Превращение обратимое и происходит по типу монокристалл-монокристалл.

$\text{Ag}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{Se}$ при комнатной температуре двухфазный. Одна из фаз принимает орторомбическую структуру Ag_2Se с параметрами решетки $a=4.333 \text{ \AA}$, $b=7.06 \text{ \AA}$, $c=7.764 \text{ \AA}$, $\rho_x=8.24 \text{ г/см}^3$, а вторая фаза кристаллизуется в орторомбической структуре AgCuS . При температуре 488 К обе фазы одновременно превращаются в ГЦК модификацию с параметром решетки $a=6.107 \text{ \AA}$, $Z=4$, пр.гр. $Fm3m$, $\rho_x=7.250 \text{ г/см}^3$. Превращение обратимое и происходит по типу монокристалл-монокристалл.

$\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ при комнатной температуре состоит из трех фаз: I – фаза по размерам решетки идентична низкотемпературному орторомбическому Cu_2Te с параметрами решетки $a=7.319 \text{ \AA}$, $b=22.236 \text{ \AA}$, $c=36.458 \text{ \AA}$, $\rho_x=7.41 \text{ г/см}^3$; фаза II кристаллизуется в орторомбической структуре AgCuSe ; III – кубическая фаза с алмазаподобной структурой с параметром решетки $a=7.319 \text{ \AA}$, $\rho_x=7.94 \text{ г/см}^3$. При 444 К обе орторомбические фазы превращаются в кубическую фазу. Превращение обратимое, т.е. при охлаждении образец превращается в первоначальное состояние.

Из параметров решетки всех составов рассчитали коэффициенты термического расширения по основным кристаллографическим направлениям в интервале температур от комнатной до температуры плавления.

Исследование влияния удельного количества водородных связей на упругие свойства олигомеров пропиленгликоля

*И. В. Данилов^{1, 2}, Е. Л. Громницкая¹, У. А. Поликарпова²,
А. Г. Ляпин^{1, 2}, В. В. Бражкин¹*

¹ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия*

Молекулярные глассформеры – это многочисленный класс жидкостей, имеющих обширное применение в химической, фармацевтической, пищевой и других отраслях промышленности, однако характер межчастичного взаимодействия в этих веществах изучен недостаточно. Существенную роль в межмолекулярном взаимодействии молекулярных глассформеров играют водородные связи. В исследованных нами веществах (моно-, ди- и трипропиленгликоле) массы и длины молекул отличаются, однако количество гидроксильных ОН групп остается постоянным и равно двум [1, 2]. Мы исследовали упругие свойства олигомеров пропиленгликоля под давлением как в жидком, так и в стеклообразном состоянии, а также при фазовом переходе стекло-жидкость. Исследования проводились на ультразвуковом пьезометре типа цилиндр-поршень до давления 1 ГПа в жидкой фазе и до 1.8 ГПа в стеклообразной фазе, а также при переходе стекло-жидкость при изобарических отогревах в интервале температур от 77 до 295 К. Импульсным методом измерялись продольная и поперечная скорости ультразвука на частотах 10 МГц и 5 МГц, соответственно, при этом проводились прямые измерения объема под давлением. По этим данным рассчитывались модули объемной упругости B и сдвига G .

Сопоставление результатов экспериментов выявило схожий характер поведения сжимаемости олигомеров как в жидкой, так и в стеклообразной фазе. Однако несмотря на то, что модули сдвига и объемной упругости ди- и трипропиленгликоля были существенно ниже, чем у монопропиленгликоля, их барические производные были выше, что выполнялось как в жидком, так и в стеклообразном состоянии. При отогреве от 77 К до комнатной температуры обнаружилась монотонная зависимость упругих модулей и температуры стеклования от массы молекул.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-32-00340 мол-а).

1. R. Casalini, C. M. Roland, Phys. Rev. B, 094202, 69 (2004).

2. C. Leo'n, K. L. Ngai, C. M. Roland, J. Chem. Phys., 11585, 110 (1999).

Фазовое превращение в наноструктурированной ленте-подложке на основе системы Cu-Fe

*А. Ю. Дегтяренко, А. С. Иванов,
Е. А. Головкова, М. Б. Цетлин, С. В. Шавкин*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Металлические ленты-подложки, отвечающие с одной стороны за механические свойства, а с другой, за текстуру, наследуемую к сверхпроводящему слою YBCO, являются одним из важных элементов конструкции ВТСП второго поколения.

В данной работе исследованы перспективные ленты-подложки на основе сплавов Cu-Fe [1]. По полученным электронно-микроскопическим изображениям микроструктуры для Cu-1,2 ат.%Fe и Cu-1,6 ат.%Fe, наблюдали, выделившиеся в матричной фазе и распределенные достаточно равномерно, дисперсные частицы на основе железа со средним размером 30–40 нм. Исследования биаксиально-текстурированных лент-подложек Cu-1,2 ат.%Fe и Cu-1,6 ат.%Fe проводили методом дифференциально сканирующей калориметрии (ДСК) на калориметре NETZSCH DSC 204 F1. Эксперименты осуществляли в атмосфере высокочистого аргона. Сплавы исследовали при скоростях нагрева 10К/мин. Вес образцов составлял 16,17 мг (Cu-1,2 ат.%Fe) и 16,98 мг (Cu-1,6 ат.%Fe). В интервале температур от 530 °С до 560 °С был обнаружен обратимый фазовый переход (рис.), не свойственный данной системе в соответствии с классической диаграммой состояния. Возможно, наблюдавшееся явление, обусловлено структурным фазовым переходом в подсистеме нановключений железа. Кроме того, рассматриваемый материал является суперпарамагнетиком, поэтому необходимо детальное исследование его магнитной подсистемы.

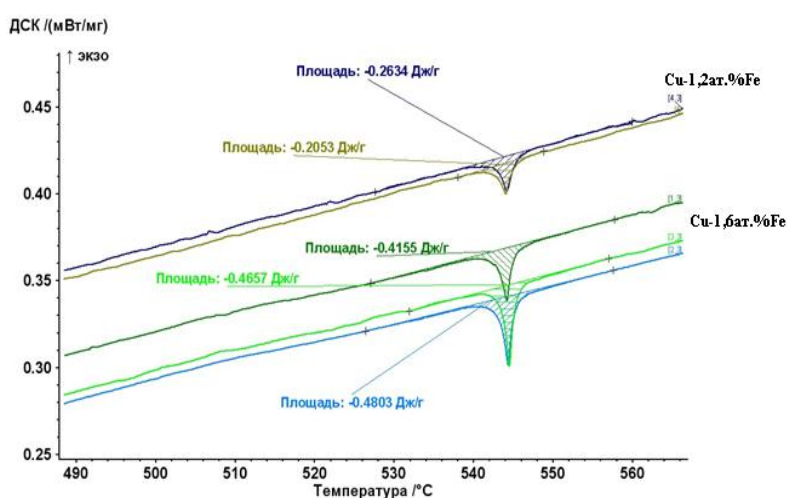


Рис. ДСК анализ образцов Cu-1,2 ат.%Fe и Cu-1,6 ат.%Fe

1. Хлебникова Ю.В., Гервасьева И.В., Суаридзе Т.Р., Родионов Д.П., Егорова Л.Ю. Письма в ЖТФ. 40. 19 (2014).

Самоорганизация в коллоидных растворах наночастиц гексаферритов

А. А. Елисеев¹, Л. А. Трусов¹, А. П. Чумаков², А. В. Васильев¹, Е. А. Анохин¹

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа ($MFe_{12}O_{19}$, где $M=Ca, Sr$) широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. В последнее время значительно возрос интерес к наночастицам гексаферрита, что вызвано несколькими уникальными свойствами: анизотропная пластинчатая форма и значительный остаточный магнитный момент вдоль оси c [1]. Подобный набор свойств обеспечивает ряд перспективных применений материала: устройства записи высокой плотности, наноструктуры и композиты, использование в медицинских целях. Однако, множество технологических процессов и медицинских областей требует на определенных этапах нахождения наночастиц во взвешенном, коллоидном состоянии. Формирование коллоидного раствора из частиц с высоким магнитным моментом является сложной задачей ввиду дополнения стандартного набора сил, действующих на частицу магнитным диполь-дипольным взаимодействием. Помимо агрегации влияние магнитного поля частиц может выражаться в самоорганизации частиц в коллоидном растворе.

Таким образом, целью настоящей работы является изучение структурирования и самоорганизации протекающих в коллоидных растворах на основе гексаферрита под воздействием внешнего магнитного поля.

Получение коллоидного раствора осуществлялось по разработанной ранее методике растворения боратной стеклокерамики [2]. Преимуществом данного метода является изначальное разделение частиц в структуре стеклокерамики, что позволяет формировать коллоидные растворы непосредственно на этапе выделения наночастиц. Полученные по данной методике растворы обладают магнитооптической активностью и проявляют склонность к образованию динамических агрегатов, оседающих со временем. Структура дисперсной фазы под воздействием внешнего магнитного поля была исследована на основании оптического отклика системы и данных малоуглового рентгеновского рассеяния. Установлено образование нитевидных динамических агрегатов со средним расстоянием между наночастицами гексаферрита около 20 нм и изучено влияние величины рН на структуру нитей.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-03-01052.

1. Pullar R.C., Progress in Materials Science, 1191, 57(7) (2012).

2. L.A. Trusov, A.V. Vasiliev, M.R. Lukatskaya, D.D. Zaytsev, M. Jansen, P.E. Kazin, Chemical Communications, 14581, 50 (2014).

Спектроскопия магнитных фазовых переходов в $\text{ErFe}_3(\text{VO}_3)_4$ и $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$

Д. А. Ерофеев^{1, 2}, А. Яблуновский², Е. П. Чукалина¹

¹ *Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия*

² *Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия*

Тригональные ферробораты $\text{RFe}_3(\text{VO}_3)_4$ ($\text{R}=\text{Y}, \text{La-Lu}$) со структурой хантита отнесены к классу мультиферроиков, представляющих интерес для спинтроники и оптоэлектроники. В формировании магнитных и магнитоэлектрических свойств кристаллов $\text{RFe}_3(\text{VO}_3)_4$ важную роль играет R-Fe обменное взаимодействие [1]. Для объяснения этих свойств необходимо знание параметров кристаллического поля (КП), которые могут быть получены из расчёта по теории КП на основе спектроскопических данных. Известно, что в ферроборатах происходит ряд фазовых переходов, которые существенно преобразуют оптический спектр. Имеет смысл исследовать эти изменения, чтобы провести последующую полную идентификацию спектра.

Монокристаллы $\text{ErFe}_3(\text{VO}_3)_4$ и $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ хорошего оптического качества были выращены раствор-расплавным методом. Из кристаллов были вырезаны ориентированные пластинки различной толщины. Спектры пропускания в линейно поляризованном свете были зарегистрированы на фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker IFS 125HR в спектральной области 1000–23000 cm^{-1} при температурах от 1.7 до 300 К.

Анализ карт интенсивностей и температурных зависимостей характеристик спектральных линий, соответствующих $f-f$ переходам в ионах Er^{3+} и Ho^{3+} позволил выявить особенности, обусловленные фазовыми переходами: антиферромагнитным упорядочением при $T_N=39$ К в $\text{ErFe}_3(\text{VO}_3)_4$ и $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$, и спин-переориентацией при $T_{SR}=5$ К в $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$. Построена схема уровней основного мультиплета $^4I_{15/2}$ (0, 46, 105, 160, 194, 244, 279, 296 cm^{-1}), и определено точное значение обменного расщепления основного состояния ($\Delta_0=6.3$ cm^{-1}) иона Er^{3+} . Это позволило промоделировать локальный максимум (аномалию Шоттки) на температурной зависимости теплоёмкости кристалла $\text{ErFe}_3(\text{VO}_3)_4$. Впервые обнаружен дихроизм в спектрах пропускания $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ при температурах ниже температуры спонтанной поляризации [1], связанный, по-видимому, с магнитоупругими взаимодействиями в кристалле.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-12-01033).

1. А.М. Кадомцева, Ю.Ф. Попов, Г.П. Воробьев, и др., Физика низких температур, Т. 36, № 6, С. 640 (2010).

Управление электронной структурой графена на подложках Re(0001) и Ir(111) с помощью интеркаляции атомов Pb

Д. А. Естюнин, И. И. Климовских, В. Ю. Ворошинин,
Д. М. Состина, А. М. Шикин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Графен – монослой атомов углерода с гексагональным расположением, в последнее время представляет большой интерес для изучения из-за своих уникальных свойств [1], и благодаря которым является многообещающим материалом для применения в нанoeлектронике и спинтронике. Управление электронной структурой графена представляет собой одну из важнейших задач в современной физике конденсированного состояния [2].

В данной работе методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) с использованием синхротронного излучения и дифракции медленных электронов (LEED) производились исследования графенового монослоя синтезированного на поверхности Re(0001) и Ir(111) методом CVD (Carbon Vapor Deposition) с последующей интеркаляцией атомов Pb. С помощью интеркаляции атомов Pb под графен удалось варьировать его электронную структуру. Было установлено, что интеркаляция атомов Pb приводит к тому, что графен становится квазисвободным с линейной дисперсией π -состояний в области точки К зоны Бриллюэна. В случае подложки Re(0001) образуется запрещенная зона в окрестности точки Дирака, величину которой удалось варьировать с помощью увеличения температуры прогрева. Теоретические расчеты [3] показывают, что атомы Pb индуцирует спин-орбитальное взаимодействие в графене, которое может приводить к образованию запрещенной зоны в точке Дирака. В данном случае графен переходит в топологическую фазу, что представляет большой интерес для применения в спинтронике и квантовых вычислениях.

1. A.K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Materials*, vol. 6, pp. 183-191, 2007.
2. E. Castro, K. S. Novoselov and S. Morozov, *Physical review letters*, vol. 99, pp. 8-11, 2007.
3. F. Calleja, H. Ochoa, M. Garnica et al., *Nature physics*, vol. 11, pp. 43–47, 2014.

Фотолюминесценция ионов $\text{Eu}(\text{III})$ в матрице наночастиц TiO_2 , полученных в условиях сольвотермального синтеза

А. Ю. Завьялова^{1, 2}, А. Н. Бугров^{1, 3}, Р. Ю. Смыслов^{3, 4}

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

² Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

³ Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Диоксид титана существует в основном в виде двух полиморфов: анатаза и рутила, которые характеризуются высоким показателем преломления, низкой поглощающей способностью в видимой и ближней инфракрасной области спектра, высокой химической и термической стабильностью. Кроме того, величина ширины запрещенной зоны и низкая энергия фононов TiO_2 делает его отличной матрицей для различных редкоземельных элементов (РЗЭ), обеспечивая их эффективное излучение в видимом диапазоне. Такие системы перспективны в производстве светодиодов и в каталитических фотохимических процессах [1]. В то же время, будучи не токсичным и биосовместимым материалом, анатаз, легированный РЗЭ, может составить конкуренцию стандартным типам люминофоров (квантовые точки и органические красители), традиционно используемым как люминесцентные маркеры в медицине и биологических приложениях [2].

В данной работе из тетра-*n*-бутоксид титана и ацетилацетонат гидрата европия методом сольвотермального синтеза получены наночастицы TiO_2 , содержащие 2 мол. % Eu_2O_3 . Согласно данным рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии наночастицы TiO_2 имеют сферическую форму, представляют собой кристаллиты со средним размером 13 ± 3 нм и структурой анатаза. Анализ результатов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показал, что при формировании наночастиц TiO_2 в условиях сольвотермального синтеза ионы $\text{Eu}(\text{III})$ локализуются в основном в приповерхностном слое. Анализ спектров фотолюминесценции показал, что в полосе испускания присутствуют характерные линии, соответствующие атомным резонансным переходам иона европия в электровалентном состоянии $3+$. При этом происходит эффективный перенос энергии электронного возбуждения в ближней ультрафиолетовой области от кристаллической матрицы наночастиц TiO_2 к ионам Eu^{3+} . На основании совокупности данных полученных спектроскопическими методами можно сделать вывод, что изученная система – $\text{TiO}_2:\text{Eu}_2\text{O}_3$ – может служить для визуализации в медицине.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-33-60227.

1. Antic Z., Krsmanovic R.M., Nikolic M.G., et al. Multisite luminescence of rare earth doped TiO_2 anatase nanoparticles // Materials Chemistry and Physics. 2012. V. 135. P. 1064-1069.
2. Li L., Tsung C.K., Yang Z., et al. Rare-earth-doped nanocrystalline titania microspheres emitting luminescence via energy transfer // Adv. Mater. 2008. V. 20. P. 903-908.

Исследование эффективности защитных покрытий от ионизирующего излучения

А. Д. Ибраева^{1, 2}, А. Л. Козловский^{1, 2}, Д. И. Шлимас^{1, 2}, М. В. Здоровец^{1, 2, 3}

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

³ Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Новое поколение стойких, легких материалов, способных удовлетворить потребность в защите от ионизирующего излучения, стыкуется с развивающейся областью нанотехнологий. Подход к изготовлению этих материалов является восходящим, так материалы будущего могут быть разработаны для нескольких функций, когда свойства материала для одной функции являются подходящими для другой.

На основании теоретических расчетов выполненных в программе SRIM PRO 2013 длин пробега были установлены оптимальные условия толщин слоев для синтеза защитных экранов. В процессе электрохимического осаждения установлено, что с увеличением разности потенциалов наблюдается увеличение среднего размера зерен, из которых формируется слой. При этом наблюдается появление крупных фракций на поверхности образца, появление которых связано с образованием осадка в результате перенапряжений в растворе электролита.

Анализ облученных образцов показал, что наибольшей эффективностью поглощения обладают защитные экраны на основе меди толщиной 10,8 мкм, что подтверждает теоретический расчет.

Снижение дозы облучения увеличивает срок службы приборов, при этом применение полимерных матриц позволяет применять защитные экраны для покрытия сложнопрофильных поверхностей, не увеличивая массу прибора.

Спин-зависимый электроперенос в $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ с диэлектрическими оболочками на межзеренных границах

*Н. А. Каланда¹, М. В. Ярмолич¹, С. Е. Демьянов¹,
А. В. Петров¹, В. А. Турченко^{2, 3}, А. М. Балагуров²*

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

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАНУ, Донецк, Украина

Известно, что на величины магнитосопротивления соединения $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ оказывает влияние состояние межзеренных границ, формируя потенциальные барьеры при протекании электрического тока [1]. При окислении двойного перовскита происходит его разложение согласно выражению $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta} + \text{O}_2 \downarrow \rightarrow \text{Sr}_{2-x}\text{FeMo}_{1-x}\text{O}_{6-z} + x\text{SrMoO}_4$. Молибдат стронция является диэлектриком, что приводит к формированию керамики $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ с диэлектрическими межзеренными оболочками.

Наноразмерные порошки $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$, синтезированные цитрат-гель методом, прессовались при $p=4$ ГПа, $T=800$ К, и отжигались в течение 5 ч при $T=700$ К и $p(\text{O}_2)=10$ Па керамики $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$. Образовавшаяся структура $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}/\text{SrMoO}_4/\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ имеет ярко выраженный полупроводниковый характер проводимости с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления ($dR/dT < 0$) в диапазоне магнитных полей 0–10 Тл и температур 300–4,2 К. При этом, в интервале температур 300–213 К в прослойках SrMoO_4 доминирует прыжковый механизм проводимости с переменной длиной прыжка по локализованным состояниям (механизм Мотта) [3]. В температурном интервале 200–130 К наблюдается переход от механизма Мотта к механизму Эфроса-Шкловского [4]. В этом случае возможна реализация нескольких механизмов электротранспорта заряда через потенциальный барьер – прыжковый механизм проводимости при наличии кулоновской щели в плотности состояний в окрестности уровня Ферми, а также механизм непосредственного спин-зависимого туннелирования электронов между магнитными зернами $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ через диэлектрический барьер SrMoO_4 . Максимальное изменение значений магнитосопротивления наблюдается при величинах магнитных полей $B \leq 0,2$ Тл, а при дальнейшем увеличении индукции магнитного поля величина магнитосопротивления выходит на насыщение, достигая 43,6 % при $T=10$ К и $B=10$ Тл. В диапазоне измерительных токов $I_{\text{изм}}=10^{-9}-3 \cdot 10^{-6}$ А реализуется отрицательное магнитосопротивление, а при $I_{\text{изм}}=3 \cdot 10^{-6}-10^{-3}$ А положительное, что указывает на смену механизма проводимости.

1. D.Serrate, J.M. De Teresa, M.R.Ibarra, Journal of Phys.: Cond. Matter 19, 1 (2007).

2. N.A.Kalanda, L.V.Kovalev, J.C.Waerenborgh et al., SAM. 7, 446 (2015).

3. V.F.Gantmakher, Electrons and Disorder in Solids (Oxford University Press, 2005).

4. S.Mitani, H.Fujimori et al., Journal of Magn. and Magnetic Mater., 198-199, 179 (1999).

Механизмы роста пространственно разделенных медных дендритов в порах SiO₂ шаблона

Е. Ю. Каниюков, Д. В. Якимчук, С. Е. Демьянов

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

Методом шаблонного синтеза [1, 2] получены структуры $n\text{-Si/SiO}_2(\text{Cu})$ с различной морфологией медного осадка. Детальное изучение процессов осаждения Cu наноструктур и их структурных особенностей позволили установить механизмы формирования компактного и дендритоподобного осадка в порах SiO₂ шаблона на монокристаллической кремниевой подложке n -типа. Показано, что металл, осаждаемый в поры SiO₂ на $n\text{-Si}$ подложке, при потенциале -0.5 В имеет склонность к формированию компактного осадка без дендритообразования. При этом на начальных стадиях осаждения образуются единичные нуклеи, которые развиваются в агломераты меди, имеющие компактную конусообразную форму, в точности повторяющую геометрию поры. Увеличение времени осаждения приводит к трехмерному росту медного осадка, выступающего над поверхностью SiO₂ шаблона, с формированием полусфер. Отсутствие ограничения по диффузии ионов Cu²⁺ в электролите при малых потенциалах осаждения позволяет получать НС с минимальным разбросом латеральных размеров.

Структуры $n\text{-Si/SiO}_2(\text{Cu})$, полученные при $U = -1.0$ В, обладают разветвленным медным осадком. Показано, что в на начальных этапах осаждения на дне поры формируется несколько нуклей, которые во время электрохимического процесса конкурируют за участвующие в формировании осадка ионы Cu²⁺. Из-за прохождения процесса синтеза в ограниченном объеме поры, имеет место перекрытие фронтов роста отдельных кристаллитов меди, что не позволяет получить развитую форму осадка до выхода металла за пределы поверхности SiO₂. Преодоление объема поры снимает ограничение на развитие НС, что при диффузионно-лимитированном процессе осаждения приводит к неравноценному развитию отдельных кристаллитов с формированием дендритов. Перекрытие концентрационных полей соседних пор приводит к замедленному росту близкорасположенных дендритов и ускоренному – отдельно стоящих и обуславливает формирование на одной подложке НС с различными размерами и формой.

1. Y.A. Ivanova, D.K. Ivanou, et al., J. Mater Sci. 42, 9163 (2007).

2. E.Yu. Kaniukov, J. Ustarroz, et al., Nanotechnology, 27, 115305 (2016).

Химический состав, атомная структура и физико-химические свойства наноразмерных пленок Fe-N и Fe-C-N на поверхности железа, сформированных комбинированными ионнолучевыми методами

*Т. С. Картапова¹, Ф. З. Гильмутдинов¹, В. Л. Воробьев¹, О. Р. Бакиева¹,
С. М. Решетников², Е. М. Борисова²*

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

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Изучено влияние предварительной имплантации ионов аргона с вариацией энергии и дозы облучения и эффекта радиационного отжига на характер последующего ионно-лучевого внедрения азота в поверхностные слои железа. Методом РФЭС исследованы химический состав и межатомные химические связи в поверхностных слоях армко-железа, модифицированных имплантацией ионов азота с вариацией энергии и дозы облучения. Методом РСА исследована атомная структура ионно-азотированных поверхностей. Впервые методом EELFS определены параметры локальной атомной структуры сверхтонких (3–5 нм) поверхностных слоев армко-железа, модифицированных имплантацией ионов азота. Определены оптимальные параметры имплантации ионов азота с целью улучшения коррозионно-электрохимических свойств железа.

Исследованы углеродные пленки, полученные магнетронным напылением, в исходном состоянии и после ионно-лучевой модификации потоками ионов аргона и азота. Методами РФЭС, РСА, EELFS, СКР, АСМ проведена их характеристика. По данным РФЭС, углерод в ионно-модифицированных пленках по глубине поверхностных слоев находится в нескольких неэквивалентных химических состояниях. На границе раздела в зоне перемешивания образуются химические связи C-Fe (облучение Ar⁺), характерные для карбидов, и N-Fe, N-C-Fe (облучение N⁺). Спектр N1s двухкомпонентный. Методом РСА выявлено образование структурных неоднородностей в переходной области «пленка-металл». Рефлексы упорядоченной структуры углерода не обнаружены. Результаты EELFS-спектроскопии позволяют предполагать о сильно разупорядоченной структуре сверхтонкого (~ 5 нм) поверхностного слоя пленки и переходной области «пленка - металл». По данным Раман - спектроскопии, при магнетронном напылении изначально формируется пленка со структурой разупорядоченного углерода с преимущественно sp² гибридизацией. При последующей ионной бомбардировке как аргоном, так и азотом степень разупорядочения возрастает.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта «Умник» дог. № 9302 ГУ2015 и проекта РФФИ 16-43-180765 р_а.

Колебательные свойства квазиодномерного антиферромагнетика RbFeSe_2

*А. Г. Киямов¹, Ю. В. Лысогорский¹, Ф. Г. Вагизов¹, Л. Р. Тагиров^{1, 2},
Д. А. Таярский¹, Z.Y. Seidov³, V. Tsurkan^{4, 5}, H.-A. Krug von Nidda⁵, A. Loidl⁵*

¹ *Институт физики Казанского федерального университета, Казань, Россия*

² *Казанский физико-технический институт РАН, Казань, Россия*

³ *Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan*

⁴ *Institute for Applied Physics of Academy of Sciences of Moldova, Chisinau, Moldova*

⁵ *Experimental Physics V, Centre for Electronic Correlations and Magnetism,
University of Augsburg, Augsburg, Germany*

В работе [1] изучались магнитные свойства квазиодномерного антиферромагнетика RbFeSe_2 . Согласно анализу теплоемкости RbFeSe_2 [1], теплоемкость представляет собой комбинацию трех теплоемкостей – одной по модели Дебая ($\Theta_D=110$ К) и двух по модели Эйнштейна ($\Theta_{E1}=158$ К и $\Theta_{E2}=520$ К) [1]. В то время как, анализ температурной зависимости полной площади мессбауэровского спектра RbFeSe_2 показал, что зависимость фактора Лэмба-Мессбауэра описывается моделью Дебая с $\Theta_D=223$ К [1]. Такое существенное расхождение в оценках температуры Дебая указывает на сложный характер колебательных свойств квазиодномерного антиферромагнетика RbFeSe_2 . Мы считаем, что *ab initio* анализ фононного спектра позволит пролить свет на причины такого расхождения.

Расчет фононного спектра RbFeSe_2 осуществлялся в рамках теории функционала плотности в обобщенно-градиентном приближении с помощью программы VASP.

Рассчитанная плотность фононных состояний RbFeSe_2 демонстрирует три области с высоких значений плотности состояний – две в районе 7 ТГц и 9 ТГц и одна в области частот 0–3,5 ТГц. Первые две области представляют собой острые максимумы, образованные исключительно колебаниями ионов железа и селена, в то время как широкий низкочастотный максимум образован в основном фононными состояниями ионов селена и рубидия. Можно заключить, более высокие частоты колебаний ионов железа в сравнении с другими ионами кристаллической решетки приводит к более высокой температуре Дебая полученной из оценки мессбауэровских спектров чем из анализа теплоемкости.

1. Seidov Z. et. al. Magnetic properties of the covalent chain antiferromagnet //Physical Review B. – 2016. – Т. 94. – №. 13. – С. 134414.

Анизотропия электронного транспорта в квазикристаллах и аппроксимантах системы Al-Co-Cu-Fe

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

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия*

В ходе исследования получены и исследованы на предмет анизотропии электронного транспорта квазикристаллы и аппроксиманты системы Al-Co-Cu-Fe. Получены результаты, показывающие различия между электротранспортными свойствами икосаэдрических квазикристаллов и декагональных квазикристаллов, а также икосаэдрических квазикристаллов и кристаллических аппроксимант данной системы. Температурный коэффициент сопротивления декагональных квазикристаллов и кристаллических аппроксимант положителен в диапазоне температур 1,7–300 К; температурный коэффициент сопротивления икосаэдрического квазикристалла отрицателен в указанном диапазоне температур. Магнетосопротивление декагональных квазикристаллов и кристаллических аппроксимант $\sim B^2$. В икосаэдрическом же квазикристалле магнетосопротивление линейно зависит от $B^{1/2}$.

Электротранспортные свойства квазикристаллов и кристаллических аппроксимант в системе Al-Co-Cu-Fe хорошо согласуются с теорией Фабера–Займана, применяемой для аморфных материалов.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 16-02-01004 А.

Хромато-масс-спектроскопическая диагностика и электронная микроскопия Fe-углеродных нанокластеров

В. С. Козлов¹, О. А. Балабас², Е. В. Убыйвовк²

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

Методами высокоэффективной жидкостной хроматографии и МАЛДИ-масс-спектропии проведен анализ продуктов электродугового синтеза Fe-углеродных нанокластеров, полученных с использованием различных прекурсоров и способов экстракции углеродного конденсата различными органическими растворителями.

Независимо от типа прекурсора (Fe_2O_3 , пиролизат фталоцианина железа) в композитном электроде, органического растворителя (о-ксилол, диметилформамид, анилин и др.), используемого для экстракции полученного углеродного конденсата, а также способов его экстракции (магнитная мешалка, ультразвуковая ванна, Сокслет) в полученных железо-углеродных экстрактах не удалось обнаружить массы, которые можно было бы соотнести с эндометаллофуллередами (ЭМФ) железа вида $\text{Fe}_n\text{@C}_{2m}$ или с их продуктами фрагментации при масс-спектроскопическом анализе.

По данным просвечивающей электронной микроскопии и масс-спектропии, исследованные нами образцы содержат пустые фуллерены C_{2n} , а также, защищенные от воздействия окружающей среды, онионные (луковичные) структуры Fe кластеров и металлические кластеры Fe, помещенные в матрицу неграфитизированного углерода на основе фуллереноподобных элементов [1]. Средний размер кластеров находится в диапазоне 5–13 nm.

Обсуждаются причины низкой вероятности образования ЭМФ Fe при электродуговом синтезе фуллеренсодержащей сажи.

1. J. F. Harris Peter, J. Mater. Sci. 2013. V. 48. P. 565–577.

Исследование оптических и фотокаталитических свойств композиционных материалов Ag/TiO₂, Ag/ZnO

Д. А. Козлов¹, В. А. Лебедев¹, К. М. Хазова¹, А. В. Гаршев^{1, 2}

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия*

Композиты состава металл-полупроводник привлекают внимание, как с точки зрения синтеза, так и с точки зрения изучения их свойств. Так, большое число работ направлено на изучение влияния модификации наночастицами металлов перспективных полупроводниковых фотокатализаторов TiO₂ и ZnO на их фотокаталитическую активность (ФКА). При этом, в ряде работ исследователи наблюдают существенные различия ФКА для идентичных по химическому составу композитов. Таким образом, основной целью данной работы является выявление зависимости микроструктуры композитов Ag/ZnO, Ag/TiO₂ на их ФКА.

Синтез представленных композитов проводили восстановлением нитрата серебра цитратом и боргидридом натрия в присутствии порошка фотокатализаторов, а также путем пропитки порошка фотокатализатора предварительно синтезированным коллоидным раствором наночастиц. В качестве полупроводниковых матриц использовались синтезированный оксид цинка и коммерчески доступный фотокатализатор TiO₂ P25 “Degussa”. Для исследования оптических свойств полученных композитов были использованы методы спектроскопии диффузного отражения (СДО) и спектроскопии характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ).

В результате выполнения работы показано, что снижение скорости роста металлических наночастиц на поверхности полупроводниковой матрицы приводит к более плотному контакту металл/полупроводник, что также подтверждается изменением ФКА композитов по сравнению с исходными полупроводниковыми фотокатализаторами.

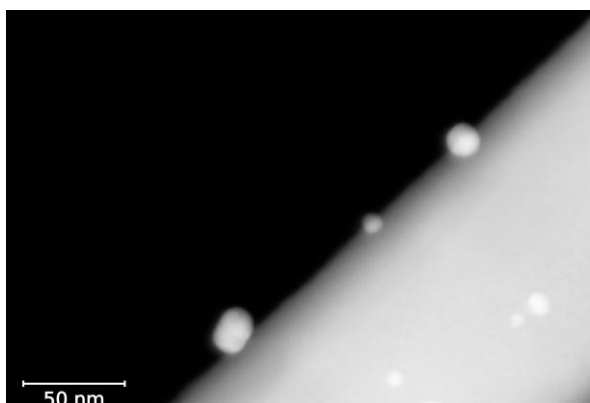
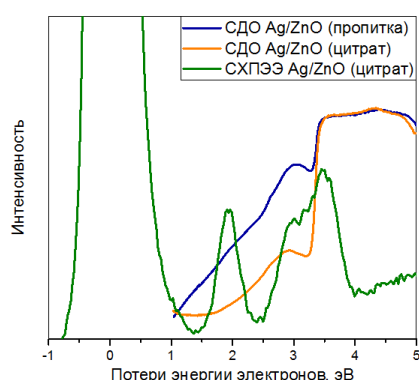


Рис. Сравнение оптических спектров поглощения и спектров ХПЭЭ композитов Ag/ZnO и микрофотография ПРЭМ композита Ag/ZnO (цитрат)

Работа проводилась при поддержке Программы научного развития МГУ им. М. В. Ломоносова и РФФИ (№ 16-33-01044).

Стабилизация полярности постоянных магнитов (NdSmDy)(FeCo)B для применения в магнитных ондуляторах

С. А. Костюченко¹, А. А. Филатов¹, А. И. Дмитриев²

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

Постоянные магниты семейства $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ нашли широкое применение в самых различных технических устройствах, работающих при комнатной температуре, благодаря их хорошим эксплуатационным свойствам и относительно невысокой стоимости. В настоящее время предпринимаются попытки использовать эти сплавы в системах, работающих при низких температурах, например, в криогенных магнитных ондуляторах на постоянных магнитах [1]. В ондуляторах редкоземельные магниты $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ охлаждают, чтобы достичь наибольших значений остаточной намагниченности и коэрцитивной силы. В окрестности температуры 135 К в монокристаллах серии $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ происходит спонтанное изменение направления вектора намагниченности (изменение полярности магнита), вызванное спин-переориентационным переходом, что затрудняет их низкотемпературную эксплуатацию [2, 3].

В данной работе установлено, что в окрестности спин-переориентационного перехода в поликристаллических спеченных магнитах (NdSmDy)(FeCo)B [4] формируются бистабильные магнитные состояния с двумя равновозможными ориентациями вектора намагниченности, соответствующими различной полярности постоянного магнита. Показано, что полярность таких магнитов в окрестности спин-переориентационного перехода может быть стабилизирована небольшим внешним магнитным полем ~ 250 Э, что открывает новые возможности для применения таких магнитов в криомагнитных системах, например в магнитных ондуляторах.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-07-00863_a.

1. T. Hara, T. Tanaka et al., Rev. ST Accel. Beams 7, 050702 (2004).
2. S. Hirose, Y. Matsuura et al., Yamauchi, J. Appl. Phys. 59, 873 (1986).
3. N.C. Koon, B.N. Das et al., J. Appl. Phys. 57, 4091 (1985).
4. А.И. Дмитриев, ФТТ 58, 2361 (2016).

Динамика молекул воды в морденитах по данным метода ^1H ЯМР

*Е. А. Крылова¹, Л. С. Сурова¹, М. Г. Шеляпина¹, Ю. Жуков¹,
А. Ф. Привалов², В. П. Петрановский³*

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

² Technical University of Darmstadt, Germany

³ CNUY, National Autonomous University of Mexico, Ensenada, Mexico

Морденит относится к группе высококремистых цеолитов. Его структура является устойчивой в достаточно широком диапазоне $\text{MO} = \text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$. От содержания Al в образцах зависит строение каркаса, наличие в нем различного рода дефектов, катионообменных мест, что приводит к различным свойствам цеолитов [1]. Цеолиты с $\text{MO} \geq 13$ широко используются в катализе [2]. Другим важным фактором, влияющим на свойства цеолитов, является вода, которая стимулирует ряд физических и химических процессов. С этой точки зрения исследование динамики воды в зависимости от MO и катионного состава цеолита является чрезвычайно важным.

В данной работе были выполнены исследования динамики молекул воды в ионообменных морденитах. Исследовались две серии образцов: CuNaMorMX и HMorY. Первая серия образцов была получена методом микроволнового синтеза из промышленного Na-морденита с $\text{MO} = 13$, где $X = 0, 1, 2, 3$ и 6 – число процедур обмена. Серия HMorY с $Y = \text{MO} = 10, 20, 24, 128$, была предоставлена TOSOH Corporation, Japan. В качестве основного метода исследования использовался метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР).

^1H ЯМР диффузометрия является универсальным методом для изучения трансляционной подвижности молекул воды в структуре цеолита, поскольку является чувствительной к скорости смещения гостевых молекул на микроны за время наблюдения от миллисекунд до секунд [3], что позволяет исследовать как межкристаллитную, так и внутрикристаллитную диффузию. В данной работе исследовалась внутрикристаллитная диффузия. Показано, что в HMorY-серии энергия активации движения водорода (E_a) в канале возрастает с ростом MO. Для CuNaMorMX частичная замена Na^+ на Cu^{2+} приводит к понижению E_a , однако с увеличением загрузки меди она остается неизменной.

Диффузионные измерения были проведены в TU Darmstadt при поддержке фонда G-RISC (Е.А. Крылова и Л.С. Сурова).

1. J. Weitkamp, L. Puppe, Catalysis and zeolites: fundamentals and applications. Berlin: Springer-Verlag, 1999.

2. H. Yahiro H., M. Iwamoto, Appl. Catal. A, 222, 163-181 (2001).

3. S. Beckert et. al., J. Phys. Chem. C, 117, 24866–24872 (2013).

Диэлектрические свойства нематического жидкокристаллического комплекса на основе гадолиния

А. Г. Курицын

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Свойства жидкокристаллических комплексов были почти полностью изучены (в своём большинстве) ещё в двадцатом веке. Совсем недавно небольшой ряд университетов научился синтезировать жидкокристаллические комплексы с вкраплениями металлов, которые приобретают, возможно, новые свойства, чем меня эта возможность и заинтересовала.

В данной исследовательской работе были проведены температурные, временные, а также от электрического поля зависимости диэлектрической проницаемости нематического жидкокристаллического комплекса на основе гадолиния (НЖКГ). Расчёт диэлектрической анизотропии; показана макроскопическая эквивалентность молекулярных механизмов ориентирующего действия электрического и магнитного полей на НЖКГ.

1. Л. М. Блинов. «Жидкие кристаллы» (2013).
2. В. Н. Цветков, Е. И. Рюмцев и др., Доклады Академии наук СССР, 211, 4 (1973).

Кристаллическая структура и низкоразмерный фрустрированный магнетизм в новом треугольном хиральном теллурате MnSnTeO_6

*М. Д. Кучугура^{1, 2}, А. И. Курбаков^{1, 2}, В. Б. Налбандян³,
А. Ю. Никулин³, М. А. Евстигнеева³*

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

В новых квазидвумерных магнетиках с хиральной кристаллической структурой, в основе которых треугольная решетка магнитных атомов в слоях, конкуренция обменных взаимодействий, фрустрации и анизотропия могут кардинальным образом влиять на фундаментальные механизмы упорядочения и соответствующие фазовые переходы. В низкоразмерных спиновых фрустрированных системах часто имеют место неколлинеарные несоразмерные спиновые упорядочения, которые уменьшают степень их спиновой фрустрации. Такой тип структуры присущ MnSb_2O_6 , магнетику с хиральной кристаллической и циклоидаальной магнитной структурой, мультиферроику с уникальным сегнетоэлектрическим механизмом переключения. Нами было синтезировано новое соединение MnSnTeO_6 с подобной слоистой тригональной структурой $P321$. Это строго изоэлектронная фаза с MnSb_2O_6 , поэтому можно было бы ожидать большого сходства между ними. MnSnTeO_6 оказался уникальным хиральным объектом, одной из отличительных черт которого является двухзарядный катион Mn. MnSnTeO_6 обнаруживает существенные отличия в устройстве магнитной структуры от другого семейства материалов с наследственной магнитной хиральностью, лангаситов, с той же кристаллической симметрией $P321$. Установлено распределение катионов Mn-Sn-Te по четырём неэквивалентным октаэдрическим позициям. Атомные факторы рассеяния Sn и Te очень близки не только для рентгеновских лучей, но и для нейтронов, поэтому трудно непосредственно определить их расположение по неэквивалентным позициям. Тем не менее, нам удалось сделать это по длинам связей с кислородом: у олова они гораздо больше, чем у теллура. Эти длины связей оказались в среднем достаточно близки к суммам радиусов ионов, т. о. однозначно определены позиции олова и теллура.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 16-02-00360 (МДК и АИК).

Методы синтеза фотокаталитически активных нанокompозитов WO_3/TiO_2

В. А. Лебедев¹, К. М. Хазова¹, Д. А. Козлов¹, И. В. Колесник¹, А. В. Гаршев^{1, 2}

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия*

Благодаря высокой фотокаталитической активности (ФКА), низкой стоимости и химической стабильности TiO_2 успешно применяется в качестве фотокатализатора. Одним из путей повышения ФКА материалов на его основе является создание композитов WO_3/TiO_2 . На основе коммерчески доступного диоксида титана (P25 Degussa) нами были получены такие композиты с различной микроструктурой оксида вольфрама.

Часть композитов WO_3/TiO_2 с различным (2, 4, 6 мольн. %) содержанием WO_3 были синтезированы методом пропитки TiO_2 раствором метавольфрамата аммония как с последующим подкислением реакционной смеси до $\text{pH}=0$, так и без подкисления. Далее образцы отжигались на воздухе при температуре 500°C , что, согласно литературным данным, приводит к разложению вольфраматов и вольфрамовых кислот. Методом РСМА было показано, что вольфрам в полученных композитах присутствует и распределён равномерно, но по данным рентгенофазового анализа в составе рентгеноаморфных фаз. ФКА данных препаратов не превышает ФКА исходного TiO_2 (P25 Degussa). Композиты WO_3/TiO_2 были также получены с использованием в качестве прекурсоров оксида вольфрама: вольфрамата и метавольфрамата аммония. Методом рентгенофазового анализа установлено наличие вольфрамсодержащих соединений в композитах. В этих композитах формируются рентгеноаморфные фазы при отжиге препаратов, независимо от концентрации TiO_2 и прекурсоров в смеси для осаждения. Для более полного протекания гидролиза вольфрамата аммония в кислой среде было увеличено время и температура синтеза. При нагревании до 60°C в течение 1 часа в кислой среде ($\text{pH}=0$) были синтезированы композиты $\text{WO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ (2, 4, 6, 8 % WO_3).

Показано, что композитные материалы, содержащие гидратированный оксид вольфрама, обладают высокой фотокаталитической активностью (130 % от исходного TiO_2) по сравнению с образцами, содержащими оксид вольфрама (менее 80 % от исходного TiO_2). При этом наибольшей ФКА обладает композиционный материал с содержанием гидратированного оксида вольфрама около 4 %.

Работа проведена при финансовой поддержке РФФИ (грант №15-03-99537).

Закономерности формирования нанонитей при темплатном электроосаждении металлов в матрицы анодного оксида алюминия

*А. П. Леонтьев¹, М. В. Яковлев¹, И. В. Росляков¹, А. А. Ноян²,
Г. А. Цирлина¹, К. С. Напольский¹*

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Долгопрудный, Россия*

Всё большее внимание исследователей привлекают к себе одномерные наноструктуры (нанонити или наностержни), наиболее распространённым методом получения которых является, простое и эффективное, темплатное электроосаждение. В качестве матриц активно применяются пористые плёнки анодного оксида алюминия (АОА), однако нередко оказывается, что в них одни нити растут гораздо медленнее других. В результате образуется второй фронт роста металла, часто не превосходящий и половины высоты каналов, что приводит к низким степеням заполнения матрицы. В данной работе была выдвинута гипотеза о причине этого явления, сформулирована теоретическая модель роста металла в каналах АОА, на основании которой были предложены методы увеличения степени заполнения [1].

В реальной пористой структуре АОА содержатся не только прямые каналы, но и значительное количество ветвящихся пор, двоения которых всегда направлены в одну и ту же сторону. Именно поэтому степени заполнения матриц с токосъёмником, сформированным на верхней и нижней поверхности, значительно отличаются. К тому же, с помощью растровой электронной микроскопии было показано, что в каналах разного типа металл растёт с разной скоростью. Так, при формировании токосъёмника на нижней поверхности медленнее растут нити в ветвящихся каналах. Это может быть связано в различной скоростью массопереноса электроактивных ионов. С помощью циклической вольтамперометрии используемого раствора электролита (0,1 М CuSO_4 + 0,1 М H_2SO_4) были определены границы кинетического и диффузионного режимов и показано, что переход из диффузионного (–0,4 В отн. Ag/AgCl) даже в смешанный режим (–0,2 В) уменьшает различия и приводит к значительному росту степени заполнения. Было также показано, что уменьшение толщины матрицы (от 90 до 30 мкм) приводит к уменьшению доли диффузионного тока и, как следствие, к росту степени заполнения каналов в АОА металлом.

1. A.A. Noyan, A.P. Leontiev et al., *Electrochim. Acta* 226, 60 (2017).

Морфология и химический состав изломов и границ зерен сплавов алюминия

Г. В. Литвиненко, А. А. Блатов

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

При разработке перспективных материалов проблема управления их структурно-фазовым состоянием чрезвычайно важна. Известно, что многие свойства поликристаллических материалов определяются наличием примеси в межзеренной границе. Сами границы зёрен и дефекты в них влияют на многие свойства поликристаллических материалов. Образование концентрированного раствора примеси в границе и возникновение зернограницных преципитатов приводит к ухудшению механических свойств материала и является одной из причин отпускной хрупкости конструкционных материалов и сплавов. Согласно традиционным представлениям, изменение химического потенциала растворенных атомов в межзеренной границе приводит к зернограницным сегрегациям и провоцирует распад сплава в области термодинамической неустойчивости, определяя морфологию выделений в объеме зерна [1–3]. Но, наши знания о процессах в них очень ограничены, так как структуры границ зёрен очень легко поддаются изменениям, существует ряд теоретических численных атомистических расчетов образования сегрегаций примесей, но их экспериментальное обнаружение в легированных алюминиевых сплавах почти не представлено [4–6].

Данная работа посвящена экспериментальному обнаружению зернограницных сегрегаций в системах Al-Zn, Al-Ge и Al-Cu. Экспериментально было рассмотрено их распределение при разных концентрациях примеси и скорость роста в данных системах сплавов. Данные по химическому составу, размерам и скорости роста зернограницных сегрегаций были использованы для численного моделирования методом Монте-Карло процессов диффузии в границах зёрен и образования дефектов в данных сплавах, а также моделирования морфологии приграничной области излома [7–10]. Для исследования границ зёрен сплавов алюминия применялось жидкометаллическое охрупчивание с помощью галлийсодержащих водных растворов сплавов [11, 12], а также методы сканирующей электронной микроскопии и Оже-спектроскопии. Исследования изменения морфологии поверхности границ зёрен производилось на атомно-силовом микроскопе. Для морфологических характеристик было получено количественное совпадение с теорией Свифта-Хоэнберга. Таким образом, на практике использование численных методов может помочь нам предсказывать и контролировать процессы, происходящие в границах зёрен и, возможно даст более глубокое понимание процессов в межзеренной границе. Получены гистограммы количественных зависимостей характеристик рельефа границ, данные гистограммы указывают на то, что при химическом травлении происходит выравнивание границ, вызванное образованием атомного слоя галлия на поверхностях границ зёрен. На примере сплавов системы Al-Zn, Al-Ge и Al-Cu показано, что при ма-

лых концентрациях примесей с помощью галлийсодержащих водных растворов удаётся получить хрупкий излом, а при больших концентрациях – нет, при больших концентрациях происходит реакция с алюминием и сплавы разрушались. Было выявлено наличие рельефа на поверхности излома после ионного травления, также были изучены и описаны морфологические характеристики рельефа излома, дефектов в нём и их химический состав.

1. Suzuki A., Mishin Y. Diffusion mechanisms in grain boundaries in conventional and nanostructured materials, Minerals, Metals & Materials Soc., 2004.
2. Minnich A.J., Dresselhaus M.S., Ren Z.F., Chen G. Bulk nanostructured thermoelectric materials: current research and future prospects, Energy Environ. Sci., 2009.
3. Lu L., Chen X., Huang X., Lu K. Revealing the maximum strength in nanotwinned copper. Science, 2009.
4. Квасов Ф.И., Фридляндер И.Н. Промышленные алюминиевые сплавы. – М.: Металлургия, 1984.
5. Мондольфо Л.Ф. Структура и свойства алюминиевых сплавов, М: Металлургия, 1979.
6. Белов Н.А. Фазовый состав алюминиевых сплавов. М: Изд-во МИСиС, 2009.
7. Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. Термодинамика и кинетика границ зёрен в металлах. М: Металлургия, 1986.
8. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зёрен и фаз. М: Машиностроение, 1991.
9. Stoop N., Lagrange R., Terwagne D., Reis P., Dunkel J. Curvature-induced symmetry breaking determines elastic surface patterns, Nature Materials, 2015.
10. Holm E.A., Foiles S.M. How grain growth stops: a mechanism for grain-growth stagnation in pure materials, Science 328, 2010.
11. Kovaleva K., Karpushkina A., Litvinenko G., Popova T., Rodin A. Ga Penetration along the Grain Boundaries of Aluminum Alloys. Defect and Diffusion Forum Vol. 363 2015.
12. Ковалёва К.Е., Родин А.О., Подгорный Д.А. Особенности взаимодействия поликристаллического Al с водными растворами, содержащими Ga, Поверхность 2016.

Способы модификации структуры и свойств нанокompозита «целлюлоза – углеродный компонент»

С. В. Логинова, В. Б. Пикулев, А. А. Латуга, Д. В. Логинов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Дана интерпретация зарядопереноса, анизотропии электрофизических и оптических свойств композитов на основе аморфной целлюлозы.

Матрицей композитов была измельченная микрокристаллическая целлюлоза (МКЦ). Вторым компонентом был порошок фуллеренов C_{60} или порошок аморфного углерода, который смешивался с целлюлозой до или после размола. В ряде экспериментов проводилась обработка образцов дистиллированной водой, которая вводилась в размол в капельном виде, или в прессованный образец методом ультразвукового испарения.

При совместном измельчении наблюдается уменьшение размеров областей когерентного рассеяния компонентов.

Образцы, за исключением образцов с аморфным углеродом, демонстрируют свойства, характерные для материалов с ионной проводимостью. Образцы аморфной целлюлозы не показывают анизотропии электрофизических свойств. С увеличением количества порошка C_{60} электрическое сопротивление материала уменьшается.

При обработке водяным паром проводимость образцов возрастает, однако увеличение количества фуллеренов приводит к снижению влияния воды. Блокада пор фуллеренами в целлюлозной матрице препятствует формированию водяных мостиков, обеспечивающих ионную проводимость. При первичной регистрации ВАХ для композитов, содержащих воду, наблюдались флуктуации тока при постоянном напряжении, приводившие к «аномальному» виду ВАХ. Повторные измерения демонстрировали воспроизводимый квазилинейный характер ВАХ, разный по величине и наклону для разных образцов. Показано, что формируется упорядоченное расположение молекул воды внутри мезопористой структуры, которое изменяется при изменении расположения образца относительно медных электродов.

При совместном помолу смеси фуллеренов и МКЦ наблюдается люминесцентный спектр, в котором проявляется широкая полоса с максимумом при 720 нм. Это свидетельствует о появлении новых оптически активных энергетических центров, которые проявляют себя и как центры поглощения света, определяя иную окраску образцов, изменяющуюся от серой до бордовой.

Ионообменные и ионопроводящие свойства сложных оксидов сурьмы

Ю. А. Луницкая, О. А. Меженкина, Д. А. Калганов

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Синтез материалов с ионопроводящими и ионообменными свойствами, способными работать в качестве мембран в электрохимических устройствах, является одной из актуальных задач. Такие материалы могут быть получены на основе оксидов пентавалентной сурьмы, гидратированные формы которых имеют структуру типа пирохлора. При нагревании они оказываются неустойчивыми и превращаются в фазы с другим составом и симметрией кристаллической решетки.

Стабилизировать ионный каркас оксидных соединений сурьмы можно путем гетеровалентного замещения части Sb^{5+} на W^{6+} или Mo^{6+} при нагревании, что позволяет получить ряд твердых растворов с широкой областью гомогенности. Замещение K^+ на H^+ и ионы Li^+ , Na^+ , Ag^+ металлов позволит получить керамики, обладающие ионообменными и ионопроводящими свойствами. Однако в литературе отсутствуют подробные данные об ионном обмене в этих соединениях, не приводятся и исследования состава и структуры гидратированных форм антимонат - вольфраматов и антимонат - молибдатов.

В связи с этим целью настоящей работы являлось исследование ионообменных свойств антимонат - вольфраматов состава $\text{Me}_x(\text{H}_3\text{O})_{1-x}\text{WSbO}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (где $\text{Me}^+ = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Ag}^+$; $0 \leq x < 1.0$ $0 \leq n < 2$), а также изменение структурных параметров при замещении протонов на ионы одновалентных металлов.

В работе приведены результаты исследований изменения структурных характеристик вольфрамосурьмяной кристаллической кислоты состава $\text{H}_3\text{OWSbO}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ при ионном обмене протонов на ионы Li^+ , Na^+ , K^+ , Ag^+ .

Установлено, что при замещении протонов на ионы металлов образуется непрерывный ряд твердых растворов с ограниченной областью растворимости, и определена зависимость параметра элементарной ячейки от величины ионного радиуса металла.

Кроме того, обсуждаются вопросы образования и устойчивости твердых растворов на основе сложных оксидов сурьмы в концентрационных и температурных интервалах. В рамках структуры типа пирохлора предложена модель заселенности ионами по правильной системе точек и изучен механизм ионного переноса в полученных соединениях.

Особенности электропереноса в объемных нанокompозитах CuO с углеродным наполнителем

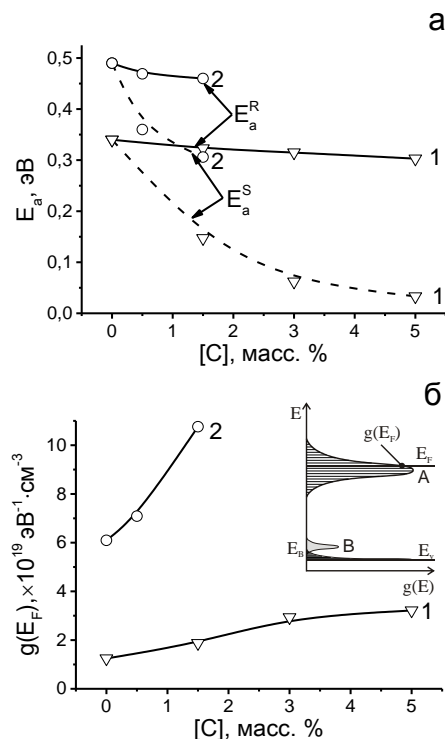
В. А. Макагонов, Ю. Е. Калинин, В. А. Панков

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Образцы объемных нанокompозитов CuO с углеродным нанонаполнителем были получены по керамической технологии методом горячего одностороннего прессования на воздухе при давлении 500 МПа и температуре 375 °С. В качестве исходных материалов использовался наноразмерный порошок оксида меди CuO полученный методом электрического взрыва медного проводника в атмосфере кислорода (ООО «Передовые порошковые технологии» г. Томск). Активным наполнителем служили углеродные нановолокна (УНВ) «ТАУНИТ», синтезированные газопиролитическим методом, и углеродный наполнитель, полученный помолом высокопрочной высокомодульной углеродной ленты ЛУ-3 (УЛ).

Исследования зависимостей удельного электрического сопротивления и термоэдс в области низких температур показали, что в диапазоне 250–300 К электроперенос осуществляется прыжками переменной длины в хвосте валентной зоны, а при температурах ниже 250 К наблюдается прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка по межзеренным границам CuO. В работе были сделаны оценки энергии активации электропроводности E_a^R , термоэдс E_a^S (рисунок а) и плотности локализованных состояний на уровне Ферми $g(E_F)$ (рисунок б и область А на вставке). На основании этих оценок предложена зонная диаграмма полученных нанокompозитов, схематическое изображение которой представлено на вставке рисунка б. Добавление углерода приводит к появлению в энергетическом спектре носителей заряда дополнительных состояний (область В на вставке рисунок б), расположенных вблизи потолка валентной зоны и связанных с границами раздела CuO – углерод. Это объясняет появление прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка в хвосте валентной зоны и изменение плотности локализованных состояний на уровне Ферми при увеличении содержания углерода в композите.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания (проект № 3.1867.2017/ПЧ).



Локальное атомное строение наночастиц CdS в полиэтилене

А. В. Максимова, В. Г. Власенко, А. В. Козинкин

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, Россия*

Наночастицы халькогенидов металлов обладают уникальными оптическими свойствами и представляют значительный практический интерес, что делает их предметом многочисленных исследований. Одним из способов получения наночастиц CdS является метод термодеструкции координационных комплексов кадмия в растворе-расплаве полимера, который позволяет стабилизировать их размеры. В настоящей работе методом рентгеновской спектроскопии поглощения проведено исследование локального атомного строения серии образцов наночастиц CdS с содержанием Cd масс. 20 %, 30 % и 40 % в матрицах полиэтилена (ПЭ) и полиэтилена высокого давления (ПЭВД). Рентгеновские CdK-края поглощения получены в НИЦ Курчатовский институт (Москва).

На рисунке приведены модули Фурье-трансформант (МФТ) EXAFS Cd K-краев серии образцов CdS+ПЭ(ПЭВД).

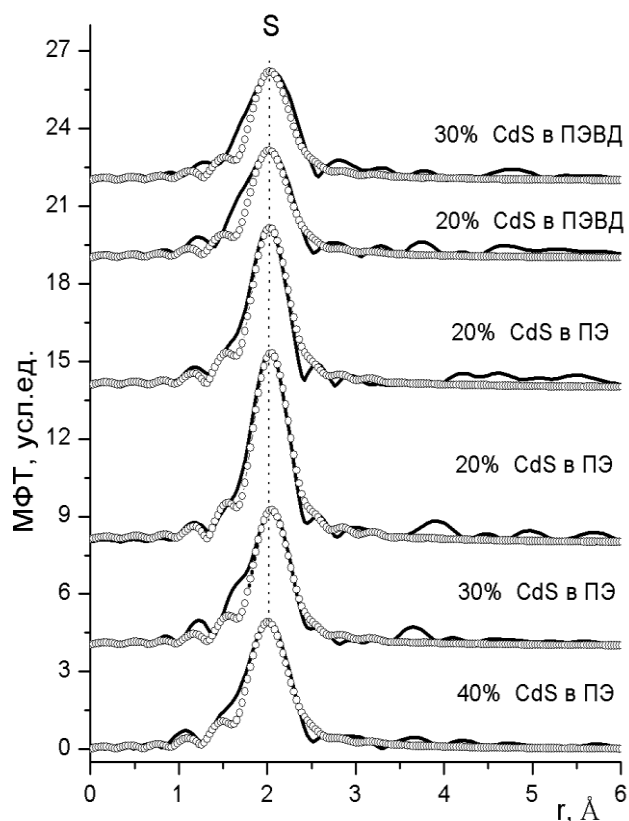


Рис. МФТ EXAFS CdK-краев наночастиц CdS в ПЭ(ПЭВД)

Как видно из рисунка, в МФТ всех образцов проявляется только ближайшая координационная сфера (КС), содержащая атомы S. Отсутствие вклада в спектр от второй сферы (Cd...Cd) объясняется высокой степенью разупорядоченности положений атомов в наночастицах. Из теоретического анализа EXAFS установлено, что во всех образцах координационное число для первой КС составляет от 2 до 3.1, а расстояния Cd...S находятся в интервале 2.52–2.54 Å. Такие значения локального атомного строения характерны для наноразмерных частиц CdS с диаметром 3–6 нм и имеющих структуру вюрцита. Существенных различий в характеристиках наночастиц CdS в зависимости от % содержания

или вида матрицы не наблюдается, что, по-видимому, обусловлено их высокими концентрациями в полимере.

Основные этапы формирования латентных треков в полимерах

М. Ю. Матросова, О. В. Литвиненко

*Дмитровградский инженерно-технологический институт НИЯУ МИФИ,
Дмитровград, Россия*

Хронологическая последовательность физических, физико-химических и химических взаимодействий в процессе образования, формирования и выявления латентных треков представлена в виде схемы на рисунке.

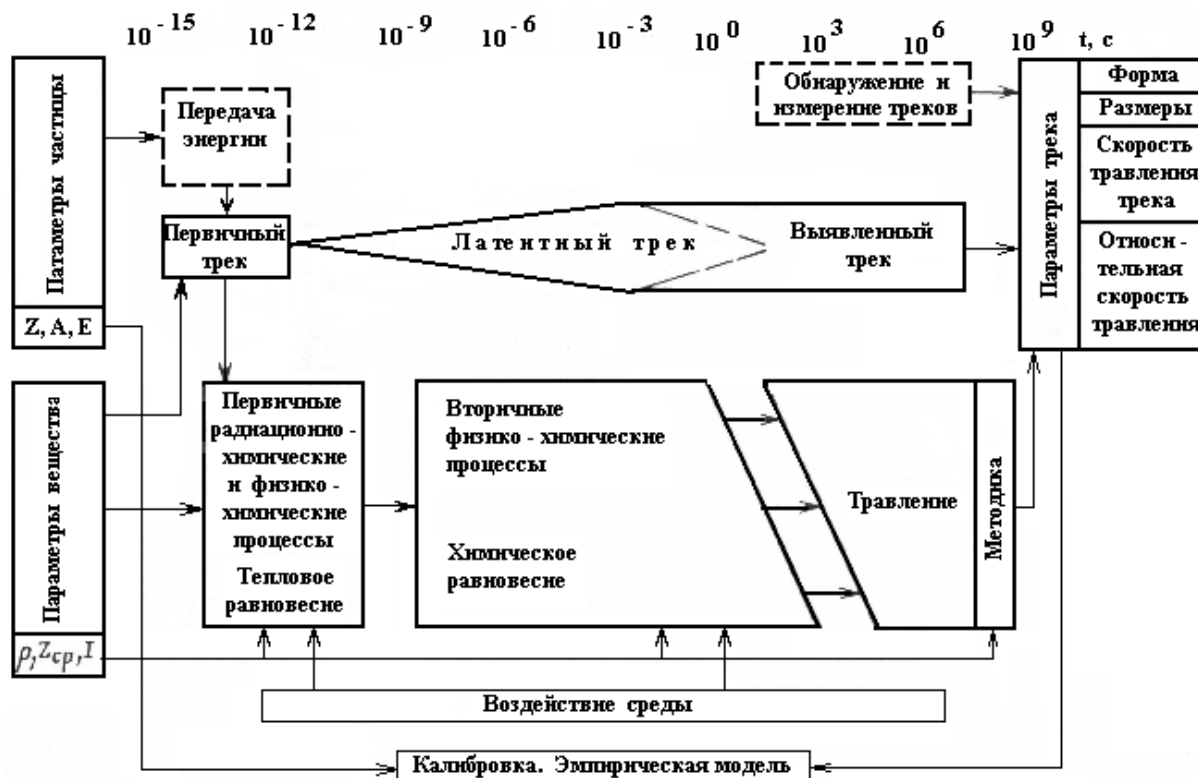


Рис. Общая схема формирования и выявления треков [1]

На первой стадии процесса в результате взаимодействия излучения с веществом образуются ионизованные и возбужденные молекулы и δ -электроны, что является областью радиационных нарушений или первичного трека частицы.

Вторая стадия заключается в переносе и передаче энергии излучения, что приводит к установлению теплового равновесия области трека. Часть возбужденных молекул вещества переходит в основное состояние путем излучения фотонов или в результате безызлучательных переходов. По окончании второй стадии процесса энергия оказывается сконцентрированной возбужденными молекулами и свободными радикалами, а электроны, замедлившиеся до тепловых энергий, захватываются ловушками.

На третьей стадии происходит ряд физико-химических процессов, совокупность которых направлена на установление химического равновесия в области латентного трека. Преобладание тех или иных процессов определяется структурой первичного трека, физико-химическими свойствами молекул полимера и в значительной степени составом и состоянием среды.

Окончательный эффект в полимере представляет собой большое количество разорванных молекулярных цепочек, что приводит к уменьшению средней относительной молекулярной массы вещества. В результате вдоль траектории образуется область, в которой находится вещество с измененной структурой, обладающее, повышенной химической растворимостью.

1. Головкин, В.М. Трековые мембраны, особенности получения, модификация мембранных свойств и темплетные металлические структуры / Головкин.В.М. [и др] // Изд. ТГУ. – 2007. – №10. – т.3. – С.270-275.

Влияние постоянного магнитного поля на процесс фазообразования в алюминиевом сплаве Al-Li

М. С. Морозов, Ю. В. Осинская, А. В. Покоев

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

В работах [1, 2] показано, что наложение постоянного магнитного поля (ПМП) на искусственное старение бериллиевой бронзы БрБ-2 приводит к изменению структуры, размера и количества фаз в сплаве, что и определяет значительное увеличение микротвердости этого сплава до ~ 30 %, наблюдается отрицательный магнитопластический эффект (МПЭ). В связи с этим, ввиду широкого применения алюминиевых сплавов в различных отраслях промышленности, существует не только научный, но и практический интерес изучения МПЭ в этих сплавах.

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования влияния ПМП на микротвердость и фазообразование в состаренном алюминиевом сплаве Al-Li.

Анализ полученных экспериментальных данных показывает, что 1) наложение ПМП напряженностью 7 кЭ на старение алюминиевого сплава Al-Li при времени 8 ч приводит к увеличению микротвердости до 11 %, наблюдается отрицательный МПЭ; 2) обнаружено, что ПМП замедляет процесс фазообразования и увеличивает время релаксации состаренного сплава; 3) наложение ПМП приводит к уменьшению полуширины линий, соответствующих α -твердому раствору на основе алюминия, что свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры сплава. Однако, линий, соответствующих другим фазам, не обнаружено.

Полученные результаты стимулируют проведение дальнейших исследований МПЭ в алюминиевых сплавах.

1. Osinskaya J.V., Pokoev A.V. Influence of the constant magnetic field on kinetics of beryllium bronze BrB-2 aging // Defect and Diffusion Forum. – 2003. – V. 216-217. – P. 157 – 159.
2. Osinskaya J.V., Pokoev A.V., Perov N.S. The Magneto-Plastic Effect at Beryllium Bronze after Aging in the Constant Magnetic Field // Defect and Diffusion Forum. – 2006. – V. 249. – P. 111 – 114.

Анализ существующих моделей алмазных наночастиц

А. Ю. Незванов

Université Grenoble Alpes, France

В настоящее время наноалмазы (НА) активно применяются во многих сферах, лидирующими из которых являются финишное полирование, использование в гальванике и в масляных композициях. Перспективными направлениями использования НА в ближайшем будущем могут стать изготовление полимер-алмазных композиций, катализаторов с переносом заряда и модифицированных биостойких бетонов. На данный момент интенсивно исследуются возможности применения НА в отраслях медицины и биохимии [1].

В нейтронной физике порошки алмазных наночастиц интересны по причине интенсивного когерентного рассеяния очень холодных нейтронов (ОХН) [2]. Это позволило создать наиболее эффективные отражатели ОХН [3, 4], которые 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.

НА обладают широким спектром свойств, которые зависят в большой степени от способов изготовления и их химической очистки, а, следовательно, от структуры НА, их химического и элементного состава. В каждой из сфер своего применения ведутся поиски НА с оптимальным набором этих параметров. Поэтому наряду с усилившимся интересом к НА, полезно составить классификацию по наиболее существенным признакам.

В настоящей работе изложена попытка структурировать все имеющиеся теоретические и экспериментальные данные об основных свойствах НА: строении, характерных размерах, элементном составе, структуре «ядро – оболочка» и др.

Полученная классификация представляет из себя актуальную обзорную научную работу и будет полезна при планировании практических применений НА.

1. V. Yu. Dolmatov, Russ. Chem. Rev. 76, 339 (2007).
2. V. A. Artem'ev, A. Yu. Nezvanov, et al., Crystallogr. Rep. 61, 84 (2016).
3. V. V. Nesvizhevsky, Phys. At. Nuc. 65, 400 (2002).
4. E. V. Lychagin, A. Yu. Muzychka et al., Phys. Lett. B 679, 186 (2009).

Влияние импульсного магнитного поля на параметры магнитопластического эффекта в алюминиевом сплаве Al-Zn-Mg-Cu

Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, Т. А. Исаева

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Ранее авторами [1] был установлен эффект заметного возрастания пластических свойств бериллиевой бронзы БрБ-2 после старения в импульсном магнитном поле (ИМП), который, в соответствии с представлениями [2, 3], можно отнести к разновидности магнитопластического эффекта (МПЭ) в металлических сплавах. Наблюдаемый эффект увеличения пластических свойств можно классифицировать как «положительный» МПЭ. Полученные данные стимулируют интерес к исследованию закономерностей проявления МПЭ в других металлических системах, в частности, в алюминиевом сплаве Al-Zn-Mg-Cu (далее алюминиевый сплав). В данном сообщении дается краткий обзор полученных экспериментальных данных по параметрам МПЭ в алюминиевом сплаве при искусственном старении.

Анализ полученных экспериментальных результатов показывает, что 1) наложение ИМП всегда приводит к уменьшению микротвердости до ~ 58 %, т. е. наблюдается «положительный» МПЭ; 2) временные зависимости микротвердости коррелируют с временными зависимостями параметров решетки и параметров тонкой структуры, что согласуется с основными классическими закономерностями процесса старения; 3) при наложении ИМП на процесс старения сплава средний размер блоков когерентного рассеяния всегда больше, а плотности дислокаций и величина относительной микродеформации меньше, чем в его отсутствие, что свидетельствует о меньшей искаженности кристаллической решетки.

Полученные результаты стимулируют интерес к дальнейшему изучению закономерностей формирования МПЭ в рассматриваемом алюминиевом сплаве.

1. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев. Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 11, 56 (2009).
2. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, ЕА. Петржик. Кристаллография 48, 838 (2003).
3. Ю.И. Головин. ФТТ 46, 769 (2004).

Уровни электронных состояний интерфейса в поверхностно-барьерных детекторах Au-AlN-(n-Si), приготовленных методом реактивного магнетронного напыления на переменном токе

Н. В. Пилипенко^{1,2}, Н. В. Базлов^{1,2}, О. Ф. Вывенко¹, И. М. Котина²

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Недавно было показано [1], что структуры металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) на основе высокоомного кремния р-типа с туннельно-прозрачными диэлектрическими слоями AlN могут быть использованы в качестве поверхностно-барьерных детекторов (ПБД) альфа-частиц. Пленки AlN, напыленные методом реактивного магнетронного напыления (РМН) на постоянном токе, имели встроенный положительный заряд и сравнительно высокие плотности электронных интерфейсных состояний (ЭИС) на границе с полупроводником. Данные об энергетическом распределении и величинах плотностей ЭИС в ПБД-структурах имеют ключевое значение для анализа их работы, так как захват и рекомбинация носителей заряда через такие ЭИС ограничивает его энергетическое разрешение. В настоящей работе исследуются ЭИС в структурах Au-AlN-(n-Si), где тонкие слои AlN были напылены на подложки n-Si(100) методом РМН на переменном токе.

Электронно-микроскопические исследования, проведенные авторами ранее, показали, что состав и строение исследуемых пленок AlN стратифицированы по толщине [2]. В настоящей работе методом DLTS (Deep-Level Transient Spectroscopy) впервые было обнаружено, что на интерфейсе пленка-кремний имелись две группы ЭИС. К первой группе относились состояния с энергиями термоионизации в интервале (0.2–0.4) эВ и величиной поверхностной плотности, не превышающей 10^{12} см^{-2} . Они располагались в прилегающем к подложке аморфном слое пленки, толщиной порядка 5 нм, с высоким содержанием кислорода. Вторая группа ЭИС проявлялась в виде двух DLTS-максимумов, соответствующих энергиям ловушек 0.5 и 0.6 эВ. Их плотность возрастала скачком до 10^{13} см^{-2} при удалении от поверхности кремния на расстояния большие 15 нм. Эти ЭИС были обусловлены резким увеличением доли нанокристаллических зерен в объеме пленки с ростом ее толщины [2]. Помимо этого, для всех исследованных структур сдвиг напряжения плоских зон соответствовал отрицательному знаку заряда, встроенному в пленку. Таким образом, данное исследование показывает, что структуры Au-AlN-(n-Si) оказываются перспективными кандидатами для ПБД.

1. Ivanov A. M., Strokan N. B. et al. // Tech. Phys. Lett., 2009, Vol. 35, No.5, pp 459-462.

2. Bazlov N., Pilipenko N. et al. // AIP Conference Proceedings 1748, 040004 (2016)

Зависимость диэлектрических параметров монокристаллов $\text{PbSc}_{1/2}\text{Ta}_{1/2}\text{O}_3$ от условий роста и от степени упорядочения

*А. Д. Полушина^{1, 2}, Т. А. Смирнова², В. Г. Залесский²,
Т. А. Шаплыгина², С. Г. Лушников²*

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

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Сегнетоэлектрики со структурой перовскита $\text{PbV}'_{1/2}\text{V}''_{1/2}\text{O}_3$ ($\text{V}' = \text{Sc}^{3+}$, $\text{V}'' = \text{Nb}^{5+}$, Ta^{5+}) обладают гигантскими значениями пьезоэлектрических коэффициентов [1], что определяет к ним интерес в прикладном аспекте. Природа возникновения аномальных пьезоэлектрических свойств до конца не понятна и продолжает являться предметом исследований. Характерной особенностью динамики решетки $\text{PbV}'_{1/2}\text{V}''_{1/2}\text{O}_3$ является взаимосвязь симметрии и последовательности фазовых переходов со степенью упорядочения катионов V' и V'' . Особый интерес к $\text{PbSc}_{1/2}\text{Ta}_{1/2}\text{O}_3$ (PST) связан с тем, что с помощью температурного отжига динамика решетки кристалла меняется от релаксорного поведения в разупорядоченном состоянии к классическому сегнетоэлектрическому в упорядоченном [2]. В настоящей работе, с помощью диэлектрической спектроскопии исследовалось влияние условий роста монокристаллов PST (температура и скорость охлаждения расплава и др.) на степень упорядочения.

На приготовленных образцах PST с разной степенью упорядочения, $S = 0.29, 0.40$ и 0.84 проводились исследования температурных зависимостей (от 77 до 450 К) комплексной диэлектрической проницаемости в интервале частот 10 Hz – 1 MHz и проводимости. Показано, что аномалия ϵ' в виде широкого и частотно-зависимого максимума в районе размытого фазового перехода смещается в область более высоких температур с понижением степени упорядочения. Результаты исследований обсуждаются в рамках современных представлений о динамике кристаллической решетки при структурных фазовых переходах.

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 14-12-00257.

1. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Под. ред. Г.А. Смоленского, М.: «Наука», 476 с., (1971).
2. N. Setter, L.E. Cross. J. Appl. Phys. 51, 4356-4360 (1980).

Исследование процессов массопереноса через поры нанометрового размера

*А. А. Поярков¹, Е. С. Пятков², М. В. Берекчиян¹, Е. А. Чернова¹, А. В. Лукашин¹,
В. Н. Суртаев², Д. И. Петухов¹, А. А. Елисеев¹*

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *ОАО «Нефтяная компания «Роснефть», Москва, Россия*

В настоящее время нанопористые мембраны с диаметром каналов 5–100 нм активно используются в мембранной технологии для проведения процессов ультра- и микрофльтрации, первапорации, подготовки попутного нефтяного газа и в качестве подложек при создании асимметричных мембран. Данный факт обуславливает научный и технологический интерес к транспорту веществ через каналы нанометрового размера. В рамках работы исследован транспорт постоянных (H_2 , He, CH_4 , N_2 , C_2H_6 , O_2 , Ar, CO_2) и конденсирующихся газов (C_3H_8 , *i*- C_4H_{10} , *n*- C_4H_{10}), а также жидкофазных систем (вода, этанол, ацетон, изопропанол, этиленгликоль, водные растворы аминов) через нанопористые мембраны. В качестве мембранных материалов использованы мембраны анодного оксида алюминия с диаметром каналов в диапазоне 10–200 нм, трековые мембраны с диаметром каналов в диапазоне 10–100 нм и полволоконные полимерные мембраны с диаметром пор 30–500 нм. Изучены процессы массопереноса в режимах транспорта газов, капиллярного транспорта и экстракции в системах газ-жидкость при давлениях процесса 0–0,7 МПа. Установлены определяющие соотношения течения газов по механизмам Кнудсеновского и вязкого течения в зависимости от диаметра пор мембраны. Показана возможность существенного увеличения проницаемости (до 20 раз) и селективности (до 100 раз) мембран по конденсирующимся газам в режиме капиллярной конденсации. Определены оптимальные параметры микроструктуры мембран для интенсификации процессов массообмена в системах газ – жидкость. На основании полученных результатов разработана технология подготовки и осушки попутных газов для магистрального транспорта в соответствии с требованиями СТО Газпром 089-2010.

Молекулярные магнетики на основе эндометаллофуллеренов железа и их производных

А. А. Сжогина, Э. В. Фомин, В. П. Седов, В. Т. Лебедев

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В настоящее время одним из интереснейших направлений является дизайн молекулярных магнетиков. За последние десятилетия были достигнуты впечатляющие результаты: от молекулярных органических ферромагнетиков [1] до объектов молекулярной электроники и спинтроники [2].

Вскоре после открытия фуллеренов стали рассматривать возможность создания молекулярных магнетиков на их основе. Так было обнаружено, что фуллерен C_{60} , легированный тетрадиметиламиноэтиленом (ТДАЭ), оказался мягким ферромагнетиком с температурой Кюри, равной 16 К [3]. Был обнаружен эффект «магнитной памяти» в фуллеренсодержащих молекулярных магнитах [4]. Введение же переходного металла внутрь фуллеренового каркаса, обернутого диамагнитной полимерной оболочкой, существенно повышает возможности создания молекулярных магнетиков, которые будут привлекательны не только как материалы с магнитной памятью, но и как препараты для тераностики (лечения и диагностики) онкологических заболеваний.

Впервые синтезированные производные эндофуллеренов железа были охарактеризованы методами EXAFS-, УФ- и ИК-спектроскопии. Доказано эндодральное положение атома железа в фуллерене. Валентное и спиновое состояние железа в полученных эндофуллеренолах было определено путем анализа рентгеновских эмиссионных спектров $K\beta$ -линий железа. Установлено, что железо в эндофуллереноле находится в высокоспиновом состоянии (конфигурация $3d^{\uparrow 5}$) и имеет степень окисления +3.

Магнитно-релаксационные характеристики водорастворимых производных эндофуллеренов были определены методом ЯМР в полях до 10 Тл, намагниченность данных структур исследовалась методом SQUID-магнитометрии.

1. M. Tamura, Y. Nakazawa, D. Shiomi, et al., Chem. Phys. Lett. 186, 4 (1991).
2. В. И. Минкин, Известия АН. Серия химическая. 57, 4 (2008).
3. C. N. R. Rao, S. Ram, MRS Bull. 19, 11 (1994).
4. В. С. Загайнова, Т. Л. Макарова, Н. Г. Спицына, Известия РАН. Серия физическая. 74, 10 (2010).

Особенности микроструктуры и механических свойств пленок хрома, полученных методом магнетронного распыления

*Д. В. Сиделёв¹, А. О. Бордулева¹, Г. А. Блейхер¹, В. П. Кривобоков¹,
J. Drahošoupil², J. Bulíř², М. С. Сыртанов¹*

¹ *Томский политехнический университет, Томск, Россия*

² *Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic*

В настоящее время активно ведутся исследования по разработке высоко-скоростных магнетронных распылительных систем (МРС) для осаждения тонких плёнок металлов и их соединений [1–3]. Системы такого рода предполагают использование испарения (сублимацию) катода как процесс его эрозии дополнительно к классическому распылению. В этом случае важным представляется собой вопрос о влиянии плотностей потока эрозионного материала и энергии, поступающих на подложку, на структуру и свойства покрытий.

Рассмотрев данную задачу на примере осаждения хромовых покрытий, получено, что использование МРС с частично-теплоизолированной мишенью приводит к увеличению (почти в 2 раза) скорости осаждения хромовых покрытий ввиду наличия потока сублимированных атомов, существенному повышению плотности теплового потока, поступающего на подложку (в 8 раз), что обусловлено интенсивным тепловым излучением катода, нагретого до температур более 1550 К, и, соответственно, увеличению величины удельной энергии, поступающей на подложку, от 6,2 до 35,7 эВ/атом.

Эволюция параметров массо- и теплопереноса в системе «хромовая мишень-подложка» обусловила изменение кристаллической структуры покрытий от текстурированной (110) к конкурентному росту кристаллографических направлений (110) и (200), рост размеров кристаллитов до 300 нм, при классическом распылении – не более 50 нм. Это отразилось и на морфологии поверхности, а именно – установлено повышение среднеквадратичной шероховатости поверхности от 15,1 до 44,8 нм. Найдено, что твёрдость хромовых покрытий определяется температурой подложки и размерами кристаллитов покрытий.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №15-19-00026).

1. J. Vlcek et al. // 52nd Annual Techn. Conf. Proc. of the Society of Vacuum Coaters, Santa Clara, 219 (2009).
2. D.V. Sidelev et al. // Surf. Coat. Technol. 308, 168 (2016).
3. G.A. Bleykher et al. // Vacuum 132, 62 (2016).

Концентрационная зависимость характеристической температуры и среднеквадратичных смещений твердых растворов $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ в парафазе

*М. А. Сирота¹, И. В. Мардасова¹, М. А. Витченко¹, К. Г. Абдулвахидов²,
З. М. Омаров³, С. Н. Каллаев³, С. А. Садыков⁴, Б. К. Абдулвахидов⁴*

¹ *Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия*

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

³ *Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия*

⁴ *Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

Сегнето-пьезокерамика, представляющая собой твердые растворы цирконата титаната свинца $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ (ЦТС), в силу своей многофункциональности является «незаменимой керамикой» для различных областей науки и техники. Наибольший интерес представляют твердые растворы из области морфотропной фазового перехода (МФП), где сосуществуют преимущественно тетрагональная и ромбоэдрическая фазы. Многочисленные исследования керамик ЦТС, принадлежащих к этой области, показывают высокую чувствительность физических свойств к концентрационным вариациям ионов Zr и Ti, занимающих одинаковые кристаллографические позиции в кислородных октаэдрах.

В то же время практически не изученными остаются концентрационные зависимости таких важных термодинамических параметров, как характеристическая температура Θ_D и среднеквадратичные смещения $\langle U^2 \rangle$.

Целью данной работы являлось установление корреляции $x-\Theta_D$ и $x-\langle U^2 \rangle$, где x – концентрация катионов Ti в твердом растворе из морфотропного диапазона [0,4; 0,5].

Определение Θ_D и $\langle U^2 \rangle$ образцов ЦТС осуществлялось рентгеновским методом в параэлектрической фазе при двух температурах: 773 К и 873 К.

Обнаружено, что концентрационный переход из ромбоэдрической фазы в область МФП сопровождается ростом Θ_D и уменьшением $\langle U^2 \rangle$. Для области МФП характерно немонотонное поведение этих параметров, что может быть обусловлено флуктуацией концентраций на мезоскопическом уровне.

Mesostructure of biocompatible organic-inorganic nanocomposites based on bacterial cellulose including polyvinyl triazole with Cu(II)

R. Smyslov^{1,2}, *G. Kopitsa*^{1,3}, *A. Pozdnyakov*⁴, *S. Korzhova*⁴, *G. Prozorova*⁴,
*A. Khripunov*¹, *A. Tkachenko*⁵, *Yu. Gorshkova*⁶, *O. Ivankov*⁶, *V. Ryukhtin*⁷,
*S. Filippov*⁸, *L. Azarova*¹, *V. Pipich*⁹

¹ *B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC "Kurchatov Institute", Gatchina, Russia*

² *Institute of Macromolecular Compounds of RAS, Saint Petersburg, Russia*

³ *Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry of RAS, Saint Petersburg, Russia*

⁴ *A.E. Favorski Institute of Chemistry of SB RAS, Irkutsk, Russia*

⁵ *Saint Petersburg State University, Russia*

⁶ *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

⁷ *Nuclear Physics Institute of AS CR, v. v. i., Řež, Czech Republic*

⁸ *Institute of Macromolecular Chemistry of AS CR, v. v. i., Praha, Czech Republic*

⁹ *JCNS, Forschungszentrum Juelich GmbH, Outstation at MLZ, Garching, Germany*

Nano-gel films of bacterial cellulose produced by *Gluconacetobacter xylinus* (CGx) as a rigid scaffold to form the interpenetrating polymeric network (IPN) hydrogel and composites were used. CGx synthesized in stationary conditions on the surface of the nutrient medium is pellicle, which can retain water in the approximate ratio of 1:100 (dry matter:H₂O). Due to certain physicochemical properties and the unique structure, this nano-gel film is widely used as a matrix in the preparation of various organic-inorganic composite materials (after preliminary treatment). The CGx-based composites containing gold, silver, selenium nanoparticles (NPs), TiO₂, SiO₂, CdSe and calcium phosphate NPs have been described [1]. CGx can be used as a scaffold (rigid supramolecular structure) for regeneration of a wide variety of biological tissues. Thus, the authors of [2] demonstrated that CGx could serve as a matrix for mechanical reinforcement of hydrogels from poly(acrylamide), poly(vinyl alcohol) and similar polymers.

For the first time, cross-linked poly(1-vinyl-1,2,4-triazole) (PVT) was taken as the elastic second component in the INP. The IPN could be reactors to fabricate NPs for 0-valent metals. The work is aimed to characterize the mesostructure of new IPN made on the base of nano-gel films of CGx and PVT with/without Cu(II) using SANS and USANS techniques. The data obtained allow estimating the fractal dimensions, ranges of self-similarity, sizes of aggregates, clusters and particles forming them, and give the new information about IPN formation. The same objects have also been analyzed by several complementary methods (SEM, XRD, EPR spectroscopy) to get additional information on their structure and composition.

1. Volkov V.V., Klechkovskaya V.V., Shtykova E.V., Dembo K.A., Arkharova N.A., Ivakin G.I., Smyslov R.Yu. 2009, Electron Diffraction, and Electron Microscopy Crystallography Reports 54 169–73
DOI10.1134/S1063774509020011.

2. Buyanov A.L., Gofman I.V., Bozhkova S.A., Saprykina N.N., Kochish A.Yu., Netyl'ko G.I., Khripunov A.K., Smyslov R.Yu., Afanas'ev A.V. and Panarin E.F. 2016 Russian Journal of Applied Chemistry 89 772-9
DOI 10.1134/S1070427216050141.

Электролитически осажденные пленки сплавов $Ni_{80}Fe_{20}$ и $Ni_{50}Fe_{50}$ – материалы для электромагнитных экранов

А. А. Солобай, С. С. Грабчиков, А. В. Труханов

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

Над решением проблемы электромагнитной защиты работают ведущие специалисты многих стран мира. Основным и наиболее эффективным способом защиты является экранирование. Сплавы на основе переходных металлов группы железа представляют значительный интерес для разработчиков различных экранирующих систем [1]. Большой практический интерес в этом плане представляют пленки сплавов железа и никеля (45–82 % Ni) (пермаллои), полученные методом электролитического осаждения [2]. В настоящей работе проведены исследования эффективности магнитостатического экранирования пленок системы Ni–Fe с целью разработки оптимальной защиты корпусов приборов и аппаратуры широкого спектра назначения.

Магнитостатические экраны симметричного и градиентного типа на основе сплавов Ni–Fe формировались методом электролитического осаждения. В качестве подложек использовались заготовки из фольгированного медью стеклотекстолита, размером 80×80 мм². Толщина магнитного слоя экранов варьировалась в интервале от 10 до 450 мкм [3].

В результате проведенных исследований было отмечено, что с ростом толщины экранов эффективность возрастает, что связано с увеличением площади экрана и, соответственно, снижением магнитного сопротивления, а пик максимума эффективности смещается в область более высоких магнитных полей (рис. 1). Полученные результаты объяснены нелинейным характером распределения магнитной проницаемости по толщине экрана.

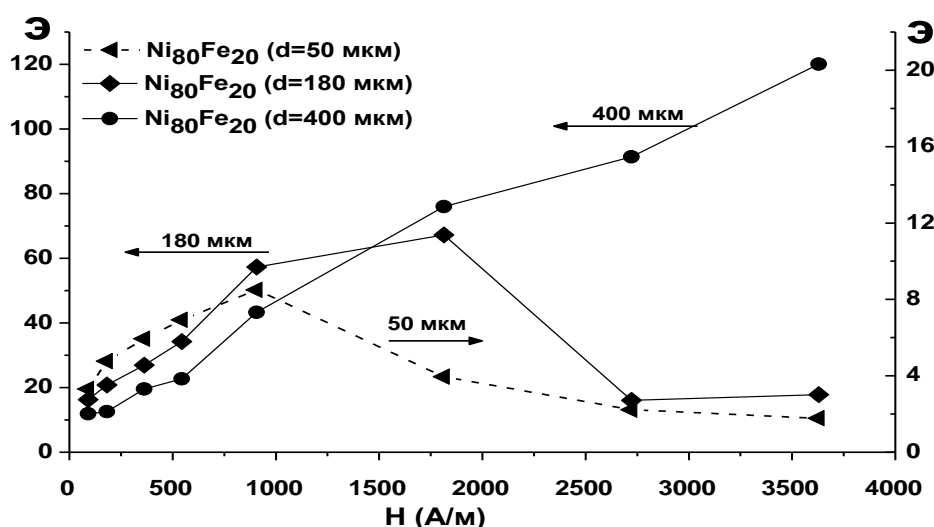


Рис. 1. Зависимости эффективности экранирования от напряженности магнитного поля для пленочных сплавов $Ni_{80}Fe_{20}$ толщиной 50 (▲); 180 (◇) и 400 (○) мкм

Вместе с тем, обнаружено, что экраны градиентного типа, содержащие слои с различными величинами магнитной индукции B_S обладают более высокой эффективностью экранирования, чем экраны симметричного типа (рис. 2).

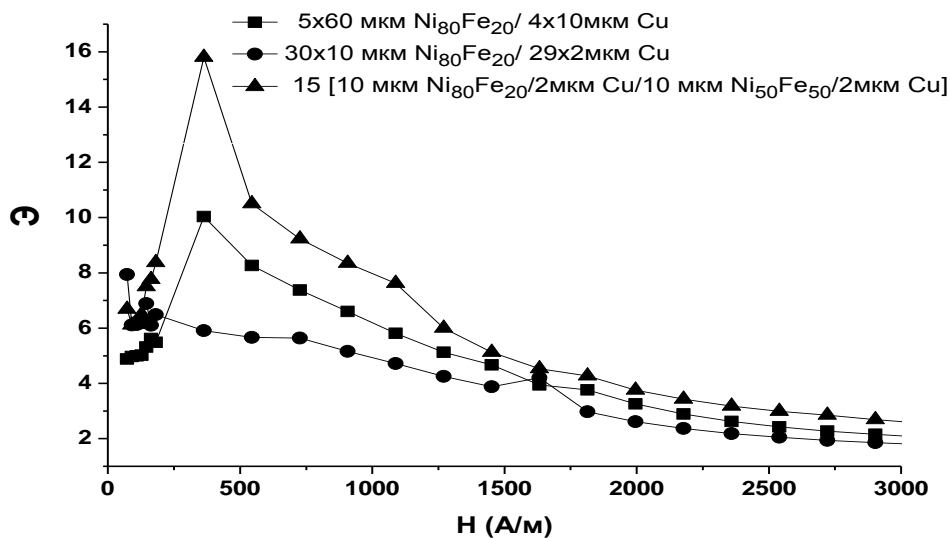


Рис. 2. Зависимости эффективности экранирования от напряженности магнитного поля для пленочных образцов сплавов $Ni_{80}Fe_{20}$ и $Ni_{50}Fe_{50}$

1. J.B. Yi, X.P. Li, J. Ding, H.L. Seet. of Alloys and Compounds, 230–236 (2007).
2. Su Xinghua, Qiang Chengwen. Bull. Mater. Sci.. 35, No. 2, 183–189 (2012).
3. С.С. Грабчиков, Л.Б. Сосновская, Т.Е. Шарапа // Патент РФ №11843, (2009).

Формирование нанонитей железа методом темплатного электроосаждения

*С. В. Сотничук¹, К. С. Напольский¹, Т. Ю. Киселева¹, А. А. Елисейев¹,
И. Сергеев², М. Herlitschke², А. С. Гончарова¹*

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany*

Магнитные материалы обеспечили решение многих технологических задач и в заметной степени способствовали научно-техническому прогрессу в современном мире. Переход к микро- и наноразмерам позволяет обнаруживать новые магнитные эффекты, такие как магнитная анизотропия и эффект гигантского магнитосопротивления [1, 2], проявляющиеся в одномерных сегментированных структурах. В данной работе для исследования магнитных свойств были выбраны нитевидные структуры железа (Fe), поскольку этот металл обладает наибольшим магнитным моментом среди *3d*-элементов.

Целью работы является разработка метода формирования массивов наноструктур железа с контролируемой геометрической анизотропией.

Для получения нанонитей Fe был применён метод темплатного электроосаждения с использованием пористых плёнок анодного оксида алюминия (АОА) в качестве матриц. Электроосаждение Fe проводили при комнатной температуре из электролита следующего состава: FeSO₄ (0,5 М), Na₂SO₄ (0,5 М), H₃BO₃ (0,4 М), C₆H₈O₆ (0,006 М).

Равновесный потенциал для выбранной системы составляет –0,67 В, рациональным диапазоном потенциалов осаждения Fe является область от –0,8 до –1 В отн. Ag/AgCl. В ходе работы были получены наноструктуры железа с фактором геометрической анизотропии > 500 (диаметр ~ 60 нм, длина превышает несколько десятков микрон). Согласно данным электронной дифракции, нанонити состоят из α-Fe и имеют зернистую структуру с микронным размером отдельных монокристаллических зёрен. Данные, полученные методами мессбауэровской спектроскопии и ядерного резонансного рассеяния синхротронного излучения, также свидетельствуют о преобладании фазы α-Fe; наличие небольшого количества парамагнитной компоненты (менее 3 %) говорит об окислении поверхности нанонитей. При комнатной температуре нанонити Fe находятся в ферромагнитном состоянии. Средний угол отклонения намагниченности от направления длинной оси нанонитей составляет около 6°. При продолжительном хранении нанокompозитов Fe/АОА на воздухе существенного окисления нанонитей в матрице не происходит.

1. T.M. Whitney, J.S. Jiang, P.C. Searson, and C.L. Chien. Science 261, 1316 (1993).

2. M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert et al. Phys. Rev. Lett. Vol. 61 (1988).

Влияние неоднородности структуры на подвижность водорода в гидридах сплавов Ti-V-Cr

*Л. С. Сурова¹, А. В. Дост², М. Г. Шеляпина¹, А. В. Иевлев¹,
С. А. Лавров¹, А. Ф. Привалов³, Н. Е. Скрыбина⁴, Daniel Fruchart⁵*

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

² University Medical Center Freiburg, Germany

³ Technical University of Darmstadt, Germany

⁴ Пермский государственный университет, Пермь, Россия

⁵ MCMF Institut Néel and CRETA, CNRS, Grenoble, France

Сплавы Ti-V-Cr являются материалами для хранения водорода [1] и с недавнего времени используются в качестве основного компонента в водородных автомобильных двигателях. Несмотря на то, что обратимая водородоемкость этих материалов составляет не более 2.3 вес. %, при давлении около 0.1–1 МПа они обладают температурой выхода водорода близкой к 300 К [2]. Кроме того, небольшие добавки данного сплава к магнию (несколько вес. %) позволяют улучшить кинетику сорбций водорода магнием [3], поскольку (i) имеют объемно-центрированную кубическую (ОЦК) структуру, что провоцирует появление ОЦК структуры магния на границе раздела [4]; (ii) водород в данных системах обладает высокой подвижностью [5], что способствует быстрой доставке водорода к магнию.

Однако важные для хранения водорода свойства, такие как водородоемкость, подвижность водорода в решетке сплава, угол наклона «плато» давления и другие, зависят от микроструктуры сплава.

В данной работе для установления взаимосвязи между структурными особенностями многокомпонентных сплавов Ti-V-Cr и подвижностью в них водорода проведены систематические исследования серии сплавов $(\text{TiCr}_{1.8})_{1-x}\text{V}_x$ ($x = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$) и их гидридов. Использовались методы рентгеноструктурного анализа, сканирующей электронной микроскопии, ^1H ядерного магнитного резонанса (релаксация, спектроскопия, диффузометрия).

Получено, что все образцы имеют неоднородное распределение элементов: существуют области богатые Ti и обедненные V, и наоборот. Образцы с малым содержанием ванадия обладают наибольшей неоднородностью. В исследуемых гидридах можно выделить два типа водорода, находящегося в разном окружении (вблизи атомов Ti и вблизи атомов V) и характеризуемого разной подвижностью. Однако, несмотря на то, что области неоднородности являются ярко выраженными, границы между ними остаются прозрачными для водорода.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-32-00267 мол_а).

1. H. Iba, E. Akiba, US Patent 6153032 A, 28 November 2000.
2. S. Miraglia et al., J. Alloys Compd. 536, 1–6 (2012).
3. S. Nachev et al., Int. J. Hydrogen Energy, 40, 17065-17074 (2015).
4. K. Klyukin et al., J. Alloys Compd. 644, 371–377 (2015).
5. A.V. Vyvadtceva et al., J. Alloys Compd. 614, 364-367 (364-367).

Исследование фрактальной структуры гибридных органо-неорганических нанокompозитов методом малоуглового рентгеновского рассеяния

Е. В. Тарасюк¹, О. А. Шилова², Ю. П. Гомза³

¹ *Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, Магнитогорск, Россия*

² *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Институт химии высокомолекулярных соединений НАНУ, Киев, Украина*

В настоящее время золь-гель процесс стал основой новейших технологий получения микро- и наноматериалов. Важное практическое значение имеют золь-гель системы, получаемые смешением золь на основе тетраэтоксисилана $\text{Si}(\text{OEt})_4$ (ТЭОС) и высокодисперсного оксидного наполнителя. Известно, что золь-гель системы – это фрактальные объекты, и фрактальная структура существенно влияет на свойства получаемых материалов. Настоящая работа посвящена исследованию фрактальной структуры ксерогелей, получаемых из кремнезоль на основе ТЭОС, а также с небольшими модифицирующими добавками олигомеров разветвленного строения. Для исследования использовались олигомеры с активными функциональными группами (-ОН, -OR, -NHCO), как с привитыми спейсерами $-\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$, так и без них. Предполагалось, что этоксильные группы спейсеров гидролизуются в кислой водно-спиртовой среде кремнезоля и образуют ковалентные связи непосредственно между олигомером и кремнеземной сеткой, формирующейся в золе. Представляло интерес выяснить, насколько сильно будет отличаться фрактальная структура этих композитов.

Методом малоуглового рентгеновского рассеяния установлено, что для всех ксерогелей характерно последовательное формирование агрегационных структур на 3-х масштабных уровнях. На низшем уровне формируются системы массово-фрактальных агрегатов размером ~1-2 нм, на 2-м масштабном уровне агрегаты, образующие структуры ~10-30 нм, не являются фрактальными объектами, а на 3-ем уровне формируются крупные агрегаты (>100 нм) со свойствами поверхностных фракталов.

Структура и состав ксерогелей были исследованы методами термического анализа. Золи после смешения их с высокодисперсным оксидным наполнителем использовались для получения электроизоляционных покрытий. Методами СЭМ и АСМ была изучена структура и морфология поверхности получаемых покрытий, а также оценено влияние введения малых количеств органических модификаторов на основные технические характеристики формируемых покрытий (толщину, гибкость, электрические характеристики). Получаемые покрытия перспективны в качестве гибкой обмоточной электроизоляции для проводов малого сечения.

Спонтанное и вынужденное перемагничивание тонких пленок GaMnSb

А. А. Филатов¹, С. А. Костюченко¹, А. И. Дмитриев²

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

В работах [1, 2] нами было исследовано спонтанное переманивание (магнитная вязкость) тонких пленок GaMnSb, содержащих кластеры MnSb. Интерес к этим образцам обусловлен спиновой поляризацией носителей заряда, индуцированной намагниченностью кластеров MnSb. Зависимости магнитной вязкости от напряженности магнитного поля $S(H)$, соответствующей угловому коэффициенту временных зависимостей магнитного момента в полулогарифмических координатах, определяются логнормальным распределением энергии магнитной анизотропии кластеров MnSb [2]. Максимум кривых $S(H)$, построенных при различных температурах, совпадает с коэрцитивной силой образцов H_C . В работе [2] этот экспериментальный факт не получил должного обсуждения и анализа. Настоящая работа направлена на то, чтобы восполнить этот пробел. Целями работы являются: создание экспериментальных условий для поиска взаимосвязи термоактивационных и полевых процессов перемагничивания кластеров MnSb, внедренных в тонкие пленки GaMnSb, а также установление механизмов этой взаимосвязи.

В работе установлено, что общность процессов спонтанного и вынужденного перемагничивания кластеров MnSb, выразится формулой, устанавливающей связь H_C с параметрами модели, описывающей зависимости $S(H)$. Полученная формула идентична известному закону Кнеллера, определяющему температурную зависимость коэрцитивной силы $H_C(T)$ невзаимодействующих суперпарамагнитных наночастиц. Анализ экспериментальной кривой $H_C(T)$ позволил определить температуру блокировки кластеров $T_B = 430$ К, поле магнитной анизотропии $H_A = 630$ Э и его дисперсию $\sigma = 1.5$.

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-5754.2016.3.

1. А.И. Дмитриев, А.А. Филатов. ФТТ 58, 1935 (2016).

2. A.I. Dmitriev, A.D. Talantsev et al., J. Appl. Phys. 119, 073905 (2016).

Синтез протонпроводящих соединений церата бария методом полимерных комплексов

Е. М. Филоненко, Ю. А. Луницкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Высокотемпературные протонпроводящие твердые электролиты – особый класс соединений, научный интерес к которым обусловлен не только феноменом протонного переноса в оксидах, но и возможностью практического применения этих электролитов в различных электрохимических устройствах – топливных элементах, электролизерах, сенсорах. Среди известных высокотемпературных протонных проводников материалы на основе $BaCeO_3$, имеющие структуру типа перовскита, относятся к наиболее высокопроводящим и продолжают активно изучаться [1]. Получить такие материалы можно методом твердофазной реакции, индукционного плавления, а также методом полимерных комплексов или методом Печини [2].

В настоящей работе представлены результаты экспериментов по синтезу соединений $BaCe_{0.9}Me_{0.1}O_{3-\delta}$ (Me^{3+} - *Y, Pr, Sm, Gd*) методом Печини, и установлена взаимосвязь между дефектностью кристаллической решетки образующихся фаз и их электрофизическими свойствами.

Согласно [3], образование соединений церата бария со структурой типа перовскита (пространственная группа *Pm-3m*) происходит в интервале высоких температур (1623–1873) К.

К достоинствам метода полимерных комплексов (м. Печини) можно отнести возможность контроля стехиометрического состава в синтезируемых образцах, обеспечение хорошей однородности через смешение исходных компонентов на молекулярном уровне в растворе, а также снижение температур образования соединений. Выбранный метод синтеза позволил получить соединения церата бария уже при температуре 1373 К.

В работе изучены особенности процессов фазообразования соединений церата бария в широком интервале температур, установлены закономерности изменения структурных параметров $BaCe_{0.9}Me_{0.1}O_{3-\delta}$. Показано, что допирование $BaCeO_3$ ионами трехвалентных металлов не изменяет типа симметрии кристаллической решетки образующихся фаз. Это свидетельствует о том, что соединения церата бария, полученные методом полимерных комплексов, изоморфны структуре перовскита.

1. T. Norby, Journal of Chemical Engineering of Japan. 40, 13 (2007).
2. M. Kakihana, M. Yoshimura, Bulletin of the Chemical Society of Japan. 72, 7 (1999).
3. D. Medvedev, Progress in Materials Science. 60, (2014).

Магнитные и структурные вклады в магнитокалорический эффект

Л. Н. Ханов, А. А. Мухучев, А. М. Алиев

*Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия*

В данном сообщении приводятся результаты исследования МКЭ и магнитострикции сплавов Гейслера Ni-Mn-In в области магнитоструктурных фазовых переходов в переменных магнитных полях амплитудой до 80 кЭ. Полученные при одинаковых условиях температурные и полевые зависимости МКЭ и магнитострикции позволяют определить вклады магнитной и решеточной подсистем в общий магнитокалорический эффект. Оценка вкладов магнитной и решеточной подсистем проводится в предположении, что магнитный вклад меняется по закону $\Delta T_m \sim H^{2/3}$, а решеточный вклад прямо пропорционален магнитострикции. В слабых полях (несколько кЭ) магнитокалорический эффект обусловлен только изменением энтропии магнитной подсистемы. С ростом магнитного поля в области магнитоструктурного перехода появляется также структурный вклад. Проведенная оценка вкладов показывает сложный характер зависимости магнитного и структурного вкладов в общий магнитокалорический эффект от температуры и магнитного поля. Причиной этого может быть нетривиальное поведение магнитострикции в переменных магнитных полях: в слабых магнитных полях (до 6 кЭ) магнитострикция наблюдается не только в области магнитоструктурного перехода, но и во всем температурном интервале от области магнитоструктурного фазового перехода (~ 240 К), постепенно уменьшаясь по величине, до точки Кюри (~ 320 К). В более сильных полях магнитострикция наблюдается только в области магнитоструктурного фазового перехода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00633 мол_а.

Исследование эволюции микро- и мезоструктуры высокодисперсного оксида $ZrTiO_4$ на разных стадиях термической обработки

*Н. В. Цвигун¹, Е. П. Симоненко², Н. П. Симоненко²,
Г. П. Копица^{3, 4}, Т. В. Хамова⁴, С. В. Сизова⁵,
В. Г. Севастьянов², Н. Т. Кузнецов², Ю. Е. Горшкова⁶*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

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

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

⁴ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁵ *Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, Москва, Россия*

⁶ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Разработке методов получения $ZrTiO_4$ уделяется достаточно большое внимание благодаря применимости в разных областях науки и техники, в частности, в качестве компонента гидрофильных мембран для ультрафильтрации, а также носителей катализаторов. Кроме того, $ZrTiO_4$ считается весьма перспективным материалом для оптических устройств, фотокатализаторов и для создания биосовместимых покрытий на стальных имплантах.

В данной работе апробирован метод получения наноструктурированного $ZrTiO_4$ с использованием золь-гель синтеза, а также методами РФА, СЭМ, МУРН, ДСК/ТГА и низкотемпературной адсорбции азота проведено изучение эволюции его структуры при термической обработке.

С использованием в качестве прекурсоров гетеролигандных координационных соединений класса $[M(O_2C_5H_7)_{4-x}(OR)_x]$ (где $M = Zr, Ti$) получен прозрачный титан-цирконий-содержащий гель. После его сушки и карбонизации ксерогеля образовавшаяся высокодисперсная система « $ZrTiO_4$ – углерод» применялась для изучения эволюции структуры оксидного продукта при термической обработке от 500 до 1000 °С. Установлено, что образование кристаллической фазы происходит в узком интервале 690–730 °С. Прокаливание при температурах 500 и 600 °С позволяет получить микро- и мезопористые рентгеноаморфные продукты состава $ZrTiO_4$ с $S_{уд} = 82 \div 150$ м²/г. При более высоких температурах обработки стартовой системы « $ZrTiO_4$ – С» образуется однофазный нанокристаллический порошок с $S_{уд} = 2.5 \div 15$ м²/г. Показано, что укрупнение частиц происходит более активно при температурах ≥ 700 °С.

Разработанная методика может использоваться и при нанесении тонких наноструктурированных пленок, в том числе и в качестве чувствительных слоев химических газовых сенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 14-03-00983-а, 14-03-31002 и 15-29-01213-офи м) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 «Нано-структуры: физика, химия, биология, основы технологий».

Исследование оптических свойств нанокompозитов на основе ZnS_xSe_{1-x} , напыленного на матрицу пористого оксида алюминия

А. И. Чукавин, Р. Г. Валеев, А. Н. Бельтюков

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Твердый раствор (ТР) ZnS_xSe_{1-x} и наноструктуры на его основе привлекают интерес исследователей благодаря изменению величины ширины запрещенной зоны с изменением состава [1, 2] от $\sim 3,66$ эВ до $\sim 2,67$ эВ [3].

Зависимость E_g от состава в ТР ZnS_xSe_{1-x} в большинстве случаев [4] описывается выражением:

$$E_g(x) = x \cdot E_g(AB) + (1 - x) \cdot E_g(AC) + b \cdot x \cdot (1 - x), \quad (1)$$

где $E_g(AB)$ – ширина запрещенной зоны соединения $A^{II}B^{VI}$, $E_g(AC)$ – ширина запрещенной зоны соединения $A^{II}C^{VI}$, b – «оптический прогиб». Таким образом, зависимость $E_g(x)$ фактически описывают одним параметром b , величина которого по различным экспериментальным данным для ТР ZnS_xSe_{1-x} лежит в интервале значений 0,0–0,63 эВ [5, 6].

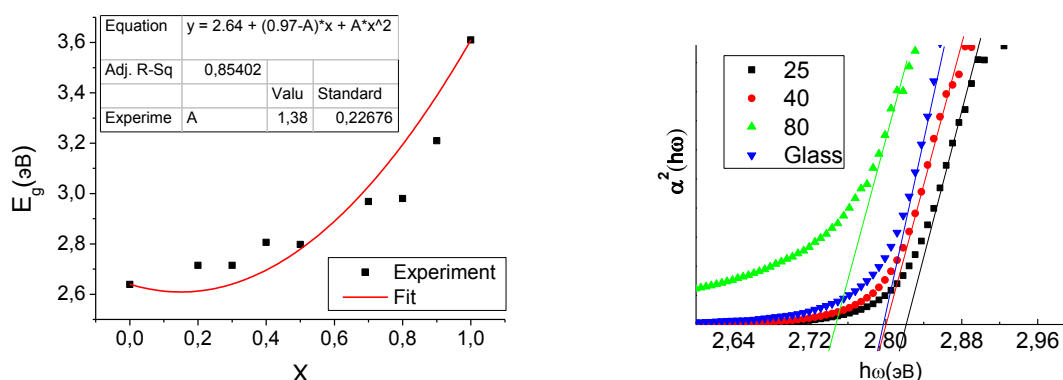


Рис. Зависимость ширины запрещенной зоны от состава (слева) и зависимость $\alpha^2(h\omega)$ (справа), здесь показан сдвиг края собственного поглощения в зависимости от подложки: «25» - ААО с диаметром пор 40 нм, «40» - ААО с диаметром пор 50 нм, «80» - ААО с диаметром пор 120 нм, Glass – гладкая стеклянная подложка

В настоящей работе были исследованы спектры пропускания наноструктур ZnS_xSe_{1-x} синтезированных методом термического испарения смеси порошков сульфида и селенида цинка в высоком вакууме (не хуже 10^{-5} Па). В качестве подложки для напыления использовались мембраны пористого анодного оксида алюминия. Полученная для синтезированных образцов ZnS_xSe_{1-x} зависимость ширины запрещенной зоны от состава $E_g(x)$ представлена на рисунке. Экспериментальные значения E_g плохо подгоняются уравнением (1) (коэффициент детерминации $R^2=0,85$), значение параметра оптического прогиба b было определено равным $1,38 \pm 0,23$ эВ (выше, чем в литературе [5, 6]), что может быть объяснено искажениями кристаллической решетки, которые возникают при формировании твердого раствора во внутривапорном пространстве оксид-

ной матрицы. Кроме того, обнаружено, что с уменьшением диаметров пор подложки ААО край поглощения смещается в высокоэнергетическую область (см. рис.).

Работа выполнена в рамках темы госзадания отдела ФХП ФТИ УрО РАН.

1. Y.K. Liu, J.A. Zapien, Y.Y. Shan, C.Y. Geng, C.S. Lee, S.T. Lee, Adv. Mater.17 (2005) 1372.
2. A.L. Pan, H. Yang, R.B. Liu, R.C. Yu, B.S. Zou, Z.L. Wang, J. Am. Chem. Soc. 127 (2005) 15692.
3. I. Shafiq, A. Sharif, L. Chung Sing, Physica E 41 (2009) 739–745.
4. В.Ф. Агекян // Основы фотоники полупроводниковых кристаллов и наноструктур. Учебно-методическое пособие. С.-Пб. (2007) С.44
5. Б.В. Габрельян, А.А. Лаврентьев, И.Я. Никифоров. Журнал структурной химии. - Том 41, № 3 (2000) 498-504.
6. Min Wang, Guang Tao Fei, Yu Gang Zhang, Ming Guang Kong, and Li De Zhang. Adv. Mater. 19 (2007) 4491–4494.

Радиационно стойкие экраны на основе композита W-Cu и эффективность их защиты от электронного излучения

Д. И. Чушкова, С. С. Грабчиков, С. Б. Ластовский, А. А. Солобай

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

В настоящее время проблема повышения радиационной стойкости авиационной и ракетно-космической техники решается несколькими методами: технологический – применение специализированных технологических процессов и материалов [1, 2], конструктивный – специализированные корпуса, методы локальной защиты [2], схемотехнический – методы мажоритирования и др. [1], методика моделирования радиационных дефектов на стадии проектирования интегральных микросхем (ИМС) [4].

Экраны на основе композита W-Cu в виде пластин размером $20 \times 20 \text{ мм}^2$ толщинами 0,64; 0,914; 1,21 и 1,49 мм изготовлены методом твердофазного синтеза. Облучение образцов проводилось на ускорителе электронов ЭЛУ-4. Энергия электронов составляла 1,6–1,8 МэВ, флюенс $\Phi = 1 \cdot 10^{13} \div 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Измерения параметров тестовых МОП-структур (элементов КМОП ИМС типа IN74AC04) проводились до и после каждой дозы облучения с помощью прибора ИППП-1/6 в пассивном электрическом режиме. Эффективность экранирования определялась по изменению вольтамперных характеристик (ВАХ), а именно – порогового напряжения ($\Delta U_{\text{пор}}$) МОП-структур, расположенных за экраном и без экрана. Параметрический отказ фиксировался при изменении напряжения $\Delta U = 0,1 \text{ В}$.

Результаты испытаний защищенных и незащищенных экранами из композита W-Cu тестовых структур n-МОП и p-МОП транзисторов представлены на рисунках а, б. Для всех защищенных экранами тестовых структур наблюдается монотонный рост ΔU во всем исследуемом диапазоне флюенсов электронного облучения.

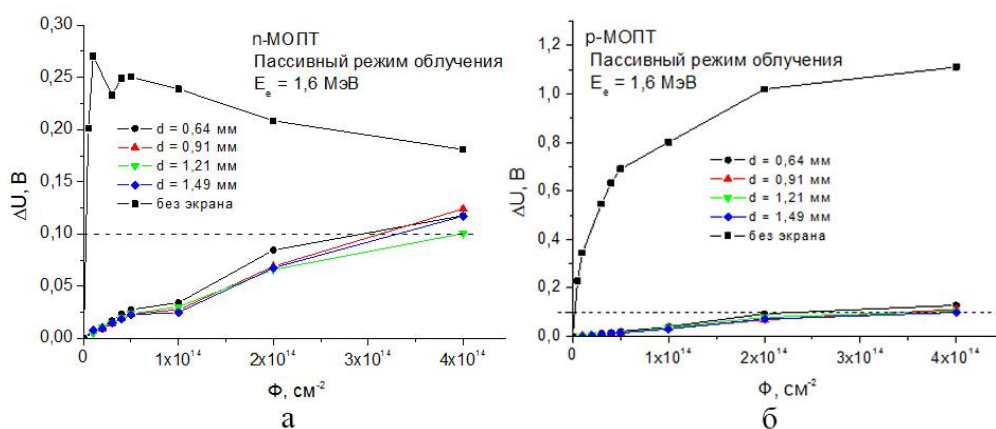


Рис. Зависимости изменения напряжения n- (а) и p-МОПТ (б) от флюенса электронного облучения Φ при облучении с экранами и без него

Основные результаты по эффективности экранирования представлены в таблице.

Таблица. Коэффициенты экранирования композитов W-Cu различной толщины при облучении электронами с $E = 1,6 \div 1,8$ МэВ и дозой $4 \cdot 10^{14}$ см⁻²

№ п/п	Толщина экрана d, мм	Коэффициент экранирования K_3	
		n-МОПТ	p-МОПТ
1	0,64	123	96
2	0,91	130	130,8
3	1,21	165	142,3
4	1,49	140	155,8

Полученные данные свидетельствуют о том, что чрезмерное наращивание толщины экранов W-Cu не дает явного выигрыша в радиационно-защитных свойствах. Это связано с влиянием тормозного излучения электронов, обладающего высокой проникающей способностью. Максимальной эффективностью экранирования ($K_3=143 \div 155$) обладают экраны толщиной $1,21 \div 1,49$ мм. Наиболее оптимальными значениями толщин экранов на основе W-Cu, с точки зрения массогабаритных параметров, являются толщины $0,9 \div 1,2$ мм.

1. Чумаков, А.И. Действие космической радиации на интегральные схемы / А.И. Чумаков. - М.: Радио и связь, 2004. – 320 с.
2. Уланова, А.В. Особенности оценки радиационной стойкости микросхем в специализированных защитных корпусах / А.В. Уланова [и др.] // МЭС-2012: материалы конф., Москва, октябрь 2012. – ИППМ РАН. – Москва, 2012.
3. Ионизирующие излучения космического пространства и их воздействие на бортовую аппаратуру космических аппаратов. Под ред. Г.Г. Райкунова. - М.: Физматлит, 2013. – 256 с.
4. Агаханян, Т.М. Радиационные эффекты в интегральных микросхемах / Т.М. Агаханян, Е.Р. Аствацатурян, П.К. Скоробогатов. - М.: Энергоатомиздат, 1989. – 256 с.

Влияние импульсного магнитного поля на процесс фазообразования в состаренном алюминиевом сплаве Al-Si-Fe-Mn-Mg

С. Г. Шахбанова, Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, К. Н. Журавлева

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

В результате ранее проведенных исследований искусственного старения бериллиевой бронзы БрБ–2 в импульсном магнитном поле (ИМП) были получены данные [1, 2], которые показывают, что ИМП оказывает положительное воздействие на пластические свойства сплава, при этом микротвердость сплава уменьшается. Наблюдается, так называемый, положительный магнитопластический эффект (МПЭ) [3, 4]. В связи с этим, целью данной работы является изучение влияния ИМП на процесс фазообразования в алюминиевом сплаве Al-Si-Fe-Mn-Mg (далее алюминиевый сплав) при старении методами микротвердости и рентгеновского анализа.

Образцы из алюминиевого сплава после закалки с 535 °С в воду отжигали при температуре 175 °С длительностью от 2 до 8 ч в ИМП с напряженностью 7 кЭ и частотой 2 Гц.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

- наблюдается положительный МПЭ, приводящий к уменьшению микротвердости до 25 %, при этом пластические свойства сплава возрастают;
- наложение ИМП на старение алюминиевого сплава приводит к увеличению интенсивности всех наблюдаемых дифракционных линий (α -твердого раствора на основе алюминия, фазы Mg_2Si и чистого Si) до 14 раз и уменьшению их полуширины, что свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры сплава;
- установлена корреляция между временными зависимостями микротвердости и параметров тонкой структуры: при наложении ИМП значения микротвердости, плотности дислокаций и относительной величины микродеформации меньше, чем без поля, а средний размер блоков когерентного рассеяния – больше.

1. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев. Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 11, 56 (2009).
2. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. ФММ. 105, 385 (2008).
3. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, ЕА. Петржик. Кристаллография 48, 838 (2003).
3. Ю.И. Головин. ФТТ 46, 769 (2004).

Магнитоэлектрические свойства мультиферроиков $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$ ($x = 0,5; 0,1; 0,15; 0,2$)

Д. М. Юсупов, А. А. Амиров, Н. З. Абдулкадирова

*Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия*

На сегодняшний день мультиферроики на основе феррита висмута исследуются достаточно активно, а поиск путей усиления магнитоэлектрического (МЭ) взаимодействия в них не прекращается. В частности, к одному из таких методов относится замещение ионов Bi двухвалентными или трехвалентными ионами различных элементов. Однако в литературе очень мало работ, посвященных изучению МЭ свойств BiFeO_3 , где замещаются ионы Fe, а незначительная степень концентрации добавки в таком случае может привести к заметному усилению МЭ параметров. С учетом этого, в качестве объектов исследования нами были выбраны керамические образцы $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$, в которых трехвалентные ионы Fe^{3+} замещены двухвалентными ионами Zn^{2+} .

Образцы $\text{BiFe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_3$ ($x = 0,05; 0,1; 0,15$ и $0,2$) были получены методом жидкофазной реакции из прекурсоров $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, которые были использованы в качестве окислителей, а $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})$ использовался как топливо для сжигания.

МЭ-эффект измерялся путем измерения переменного напряжения, возникаемого на концах образца при его внесении в переменное магнитное и постоянное подмагничивающее поле до 8 Тл. Величина поперечного МЭ-эффекта оценивалась исходя из выражения для МЭ-коэффициента по напряжению согласно формуле:

$$\alpha = dU / (d \cdot dH),$$

где dU – переменное напряжение, генерируемое на концах образца; d – толщина образца; dH – напряженность переменного магнитного поля.

Магнитодиэлектрический эффект (магнитоемкость) определялся, как относительное изменение диэлектрической проницаемости при внесении образца в магнитное поле. Магнитополевые зависимости МЭ коэффициента на частоте 10 кГц показали его линейную зависимость от приложенного постоянного поля, что находится в рамках классических представлений о МЭ взаимодействии в феррите висмута.

Магнитоемкость от приложенного магнитного поля также демонстрирует линейную зависимость за исключением области около 0,6 Тл, при котором наблюдается его максимум. Это может быть обусловлено откликом магнитных примесных фаз, обнаруженных в этих соединениях, которые вместе с основной фазой образуют микрокомпозитную структуру и вследствие магнитострикции за счет механического давления влияют на диэлектрические свойства.

Шаблонно синтезированные плазмонные наноструктуры для усиления сигнала комбинационного рассеяния света

Д. В. Якимчук

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

Известно, что усиление сигнала комбинационного рассеяния света плазмонно-активных подложек сильно зависит от формы и размеров наноструктур (НС) локализованных на поверхности. Однако, имеющиеся на сегодняшний день НС не позволяют достичь предсказанного теоретически предела усиления (детектирование единичных молекул) из-за эффекта экранирования. Предложенная в [1] идея, заключающаяся в использовании пористых матриц Si/SiO₂ [2] для пространственного разделения НС, позволяет избежать большинство негативных эффектов. Кроме того, использование пористых матриц дает возможность управлять морфологией и формой получаемых наноструктур, посредством варьирования параметрами пор и параметрами осаждения. Это позволяет изготавливать НС на базе плазмонных металлов (медь, серебро и золото) с заданной формой.

Формирование плазмонных НС осуществлялось при использовании двух методов: электрохимического и безэлектродного осаждения. При этом в качестве электролитов применялись растворы на основе плавиковой кислоты и солей меди (CuSO₄), серебра (AgNO₃) и золота (AuCl₃). Детальное исследование структурных параметров полученных НС позволило установить, что их морфология зависит как от условий синтеза (температура процесса, состав и концентрация электролита), так и от параметров шаблона (высота и диаметр пор). Показано, что используя соответствующие условия синтеза можно получить плазмонные НС с широкой номенклатурой форм: бикристаллиты, дендриты, структуры типа «азалии», подсолнухоподобные НС и др. Стоит отметить, что плазмонные НС в порах диоксида кремния на кремниевой подложке на основании меди, серебра и золота могут найти свое применение в качестве подложек для гигантского комбинационного рассеяния света, усиленного поверхностью для создания чувствительных элементов хемо- и биосенсоров.

1. V. A. Sivakov, E. Yu. Kaniukov, et al., *Journal of Crystal Growth*, 400, 21 (2014).
2. E. Yu. Kaniukov, J. Ustarroz, et al., *Nanotechnology*, 27, 115305 (2016).

Магнитоэластический эффект в состаренном алюминиевом сплаве Al-Cu-Si-Mn-Mg

К. С. Ямщикова, Ю. В. Осинская, А. В. Покоев

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Ранее в работах [1, 2] по экспериментальному исследованию искусственного старения бериллиевой бронзы БрБ–2 были получены данные, которые показывают, что постоянное магнитное поле (ПМП) оказывает положительное воздействие на прочностные свойства сплава (микротвердость сплава увеличивается до 30 %). Наблюдается, так называемый отрицательный магнитоэластический эффект (МПЭ) [3, 4]. В связи с этим, представляется целесообразным установить степень влияния ПМП на другие практически важные и широко применяемые технические сплавы, например, алюминиевый сплав типа Al-Cu-Si-Mn-Mg. В данной работе приводятся краткие результаты по комплексному экспериментальному исследованию влияния ПМП на старение алюминиевого сплава Al-Cu-Si-Mn-Mg.

Анализ полученных результатов позволил сделать следующие выводы:

1. При наложении ПМП на старение сплава наблюдается увеличение микротвердости до 8 %, т. е. имеет место отрицательный МПЭ.

2. Полученные зависимости параметров решетки от времени старения коррелируют с временными зависимостями микротвердости, что соответствует закономерностям процесса старения. Однако наложение ПМП не приводит к существенным изменениям параметра решетки сплава.

3. Установлено, что после старения в ПМП наблюдается рост количества линий, соответствующих фазе Al_2Cu , отвечающей за процесс упрочнения сплава, что свидетельствует о более интенсивном процессе фазообразования.

1. Ю. В. Осинская, А.В. Покоев. Физика и химия обработки материалов. 3, 12 (2003).

2. J.V. Osinskay, A.V. Pokoev. Fiz. Met. Metalloved. 105, 385 (2008).

3. В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, М.В. Колдаева, ЕА. Петржик. Кристаллография. 48, 838 (2003).

4. Ю.И. Головин. ФТТ 46, 769 (2004).

МРТ визуализация крови и ее дериватов

В. Я. Адельсон¹, В. В. Фролов¹, В. М. Черемисин^{1,2}

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

² СПб ГБУЗ «Городская Мариинская больница», Санкт-Петербург, Россия

Магнитно-резонансная томография (МРТ) является одной из наиболее современных и совершенных технологий получения диагностического изображения в клинических условиях. При интерпретации данных МРТ в случае посттравматических кровоизлияний важным является знание о развитии посттравматической гематомы и ее визуализация на МР-томограммах в различных режимах. К причинам внутричерепных кровоизлияний относят: гипертонию, разрыв аневризмы или кровотечения из сосудистой мальформации, низкодифференцированные опухоли или метастазы, травмы, энцефалит, тромбоз вен и (или) дурального синуса [1, 2].

SWI (Susceptibility Weighted Imaging) позволяет визуализировать следы мелких кровоизлияний по истечении длительного времени, отложения железосодержащих веществ в отдельных структурах головного мозга, а также хорошо контрастировать венозную кровь [3, 4].

В ходе работы проведен эксперимент с участием растворов 0.9 % NaCl с различной концентрацией крови в них. Сравнительный анализ изображений, полученных с использованием различных импульсных последовательностей (T1, T2, SWI, GSE, DWI), позволил выявить наиболее эффективные параметры эксперимента. Измерения проводились на высокопольном томографе Siemens Magnetom Avanto (1,5 Тл) на протяжении 14 дней.

1. Галкина Т.Н., Кондаков Е.Н. Эпидемиологические аспекты нетравматических внутричерепных кровоизлияний // Нейрохирургия. - 2000. - № 1. - С. 28 - 32.
2. Неврология и нейрохирургия / под ред. А.Н. Коновалова, А.В. Козлова; Е.И. Гусев, А.Н. Коновалов, В.И. Скворцова: учебник : - т. 1. - 2009. - 624 с.
3. Naacke EM., Xu Y., Cheng YN., JR Reichenbach. Susceptibility weighted imaging (SWI) // Magnetic Resonance in Medicine, Vol.52(3), 2004. – P. 612 - 618.
4. Naacke EM., Xu Y., Cheng YN., JR Reichenbach Susceptibility-Weighted Imaging: Technical Aspects and Clinical Applications Part1 and Part 2 // Physics Review, AJNR Am J Neuroradiol 30:19 –30, Jan 2009.

Исследование методами МУРР, ДРС и КД процесса денатурации альбумина в растворе вместе с катионным и анионным ПАВ, при различных концентрациях ПАВ и с люминесцентным зондом

С. В. Амарантов¹, М. А. Градова^{2, 3}

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

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

³ *Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия*

Метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР, SAXS) предоставляет уникальную возможность изучать структуру достаточно крупных биологических наночастиц в растворе, с размерами макромолекул существенно превышающих возможности метода ядерного магнитного резонанса и при этом не требующей какой-либо специальной подготовки образцов. Объектом исследования в данной работе являются сывороточный альбумин в растворе содержащим поверхностно-активные вещества (ПАВ) вблизи критической концентрации мицеллообразования ККМ. Методы рассеяния дают незаменимую структурную информацию, позволяющую изучать как полиморфизм мицелл ПАВ, а также механизм взаимодействия системы белок-ПАВ. Поскольку состояние альбуминовой глобулы весьма чувствительно к различным физико-химическим воздействиям, то целью работы было определить размер и структуру агрегатов белка бычьего сывороточного альбумина BSA, при различной концентрации ПАВ, методом МУРР. Данные полученные из МУРР эксперимента дают представление о взаимном влиянии белка BSA и ПАВ различного типа (анионного SDS, катионного DTAB) в широкой области концентраций ПАВ. А именно для системы BSA с додецилсульфатом натрия (SDS) происходит разворачивания макромолекулы альбумина. Установлено что белок индуцирует образование мицеллоподобных агрегатов вдоль развернутой полипептидной цепи.

При добавлении ПАВ к раствору из взаимодействия полярных групп белка и ПАВ вначале формируется гидрофобный комплекс. При этом глобула белка остается компактной. С ростом концентрации ПАВ и денатурации белка наиболее часто формируется модель комплекса белок + ПАВ типа «ожерелье и бусинки». Модель предполагает, что полипептидная цепь в растворе является гибкой, и мицеллоподобные кластеры ПАВ располагаются вдоль развернутой пептидной цепи.

Методом кругового дихроизма было исследовано связывание белка с люминесцентным зондом К-35 (N-карбоксифенилимида диметиламинафталевой кислоты). Была обнаружена оптическая активность зонда в области (350–600) нм в растворе с белком и её отсутствие в растворе без белка. Были предложены различные физические интерпретации этого явления.

Определение периодов полураспада нуклидов йод-131 (^{131}I) – йод-135 (^{135}I)

К. В. Голубева, Ю. С. Попов

*Димитровградский инженерно-технологический институт НИЯУ МИФИ,
Димитровград, Россия*

Радиоактивные изотопы йода нашли широкое применение в медицине и биологии, главным образом при лечении заболевания щитовидной железы, так как большая часть введенного в организм йода фиксируется щитовидной железой. Использование ^{131}I для диагностики заболеваний щитовидной железы очень удачно, так как концентрация его может определяться непосредственно с помощью дозиметра, регистрирующего γ -излучение ^{131}I над поверхностью железы.

Поскольку периоды полураспада являются главнейшими характеристиками короткоживущих изотопов йода при дозиметрических расчетах в ядерной медицине, а также при мониторинге работы реактора.

Для γ -спектрометрических измерений использовали три образца продукта деления из кратковременно облученного ^{235}U в высокопоточном ядерном реакторе СМ-3 в виде азотнокислых растворов в пробирках и автоматизированные γ -спектрометры с полупроводниковыми германиевыми детекторами типов ДГДК-100В и ДГДК-32-3.

Периоды полураспада и доверительные границы случайной погрешности рассчитывали методом линейного регрессионного анализа. Погрешность определения периодов полураспада нуклидов ^{132}I , ^{134}I и ^{135}I составляла 6–15 %. Наиболее точно определены периоды полураспада ^{131}I и ^{133}I , главным образом, из-за большого количества наблюдений и лучшей статистики счета. Вновь определенные в прямых γ -спектрометрических измерениях периоды полураспада изотопов йода находятся в хорошем согласии с известными научными данными. Уточнены периоды полураспада нуклидов ^{131}I и ^{135}I .

1. Хольнов Ю. В., Чечев В. П., Камынов Ш. В. и др. Характеристики излучений радиоактивных нуклидов, применяемых в народном хозяйстве. Оцененные данные. Справочник. М.: Атомиздат, 1980. С. 107.
2. Яковлева Г. В. // Тез. XVII сов. по ядерной спектроскопии. 1967. С. 45.
3. Houtermans H., Milosevic O., Reichel F. //JARI. 1980. Vol. 31, N 3. P. 153-160.
4. Kovar P., Dryak P., Pichova L. //Jad Energ. 1989. Vol. 35, N 1. P. 37.
5. White W., Martin W. M. // Can. J. Phys. 1962. Vol. 40, N 2. P. 865-870.
6. Hiddleston H. R., Browne C. P. // Nucl. Data Sheets. 1976. Vol. 17, N 2. P. 225.
7. Stang I., Tucker B. L. // Nucleonics. 1954. Vol. 12, N 8. P. 22.
8. Henry E. A. // Nucl. Data Sheets. 1974. Vol. 11, N 4. P. 512.
9. Henry E. A. // Nucl. Data Sheets. 1975. Vol. 15, N 2. P. 203.
10. Andersson G., Rudstam G., Sorensen G. // Arkiv Fys. 1965. Vol. 28, N 1. P. 37.
11. Walters W. B., Jane S. M., Smith N. L. et al. // Rhys. Rev. C. 1982. Vol. 26, N 5. P. 2273-2278.

Мультипольный подход к описанию индуцированных деформаций мембраны белок-белковых взаимодействий

И. Ю. Голушко, С. Б. Рошаль, В. Л. Лорман

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Трубчатые липидные мембраны (ТЛМ), сформированные из везикул, часто используются при изучении взаимодействий между индуцирующими кривизну белками и сильно искривленными мембранами *in vitro*. Белковые молекулы, адсорбированные на поверхности мембраны, деформируют ТЛМ и взаимодействуют друг с другом за счет индуцированной деформации. Мы предлагаем подход, моделирующий действие отдельных индуцирующих кривизну белков на липидный бислой при помощи мультиполей, представляющих собой суперпозиции точечных сил, приложенных к мембране в области адсорбции белка. В работе подробно рассматривается энергия взаимодействия белков, обусловленная деформацией мембраны. В области устойчивости ТЛМ максимальное расстояние, на котором могут взаимодействовать мультиполи, составляет порядка поперечного сечения липидной трубки. Вблизи неустойчивости, при обращении растягивающей ТЛМ силы в ноль, радиус взаимодействия мультиполей резко возрастает. Подобное поведение наблюдается и в случае плоских мембран, в которых уменьшение поверхностного натяжения приводит к увеличению радиуса взаимодействия между белками [1]. Важной особенностью работы является анализ влияния граничных условий на поведение системы. Так наряду с традиционно используемыми в подобного рода задачах периодическими граничными условиями мы рассматриваем задачу с закрепленной на концах ТЛМ. Благодаря такому подходу нам удалось объяснить высокое сродство отдельных, индуцирующих кривизну белков к областям вблизи концов ТЛМ, наблюдаемую в последних экспериментах, рассматривающих процесс образования белковых агрегатов на поверхности ТЛМ [2]. В работе также обсуждаются другие аспекты начальных стадий данного процесса.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 15-12-10004.

1. M. Simunovic, G.A. Voth, Nat. Commun. 6, 7219 (2015).
2. M. Simunovic, E. Evergren, I. Golushko, C. Prevost, H.-F. Renard, L. Johannes, H.T. McMahon, V. Lorman, G.A. Voth, P. Bassereau, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 133, 11226 (2016).

Оптические характеристики биомиметических композитов, воспроизводящих состав нативных тканей зубов человека

*Д. Л. Голощапов¹, М. С. Гуцин¹, В. М. Кашкаров¹, А. Н. Лукин¹,
П. В. Середин¹, Ю. А. Инполитов², Т. Prutskij³*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный медицинский университет им. Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия

³ Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Mexico

Для успешного решения задач современной терапевтической стоматологии, связанных с реставрацией, необходимо использовать биоматериалы, обладающие функциональными характеристиками эмали и дентина зубов человека [1]. Сегодняшние методики получения биокомпозитов дают возможность повторить морфологическую организацию зубного комплекса без воспроизведения его оптических свойств. Для воссоздания последних необходимо включение в состав биокомпозита органической составляющей. Поэтому задача по воспроизведению оптических характеристик зубной ткани в биомиметических композитах с составом, близким к эмали и дентину зуба человека, является актуальной.

В данной работе нами были получены и исследованы биомиметические материалы на основе аналога минеральной составляющей твердой ткани зуба – карбонат-замещенного гидроксиапатита (КГАП), синтезированного из биологического источника кальция, и органической составляющей, имеющей в своем составе гиалуроновую кислоту, аргинин, гистидин, лизин. Соотношение органической и минеральной составляющих композита было выбрано в соответствии с составом нативных тканей. С применением комплекса структурно-спектроскопических методов удалось показать, что спектр люминесценции интактной эмали зуба совпадает со спектром синтезированного нами КГАП, использованного в качестве минеральной составляющей биомиметических композитов. Определено, что для совпадения оптических спектров биокомпозита и интактной эмали зуба достаточно использования органической составляющей на уровне 5 %. Эмиссионные характеристики интактного дентина максимально полно воспроизводятся в спектре люминесценции биокомпозита с соотношением органической и неорганической составляющих 40/60.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (проект № 16-15-00003).

1. S. Sowmya et al., Prog. Polym. Sci. 38, 10–11, 1748–1772 (2013).

Исследование оптимальных световых доз при низкоинтенсивной лазерной терапии

А. А. Матвеева, А. Р. Варламов

*Димитровградский инженерно-технологический институт НИЯУ МИФИ,
Димитровград, Россия*

В последние годы активно обсуждается возможность применения низкоинтенсивной лазерного излучения в лечении целого ряда заболеваний кожи и внутренних органов. Основной проблемой в лазерной терапии представляет обеспечение грамотного использования методик, заключающееся в правильном подборе режимов и доз облучения.

Методы лазерной терапии разделяются по режимам облучения на две группы: непрерывные и импульсные. Результаты исследований [1] воздействия лазерного излучения на скорость роста бактерий *E. coli* свидетельствуют о перспективности использования непрерывного режима. Сопоставимое увеличение митотической активности для импульсного режима происходит при гораздо меньшей плотности средней мощности излучения (в 10^3 раз) по сравнению с непрерывным режимом [1].

В данной работе рассмотрены методики расчета оптимальных терапевтических световых доз в режимах непрерывного и импульсного излучения. Приведены основные зависимости между длительностью сеанса лазеротерапии и параметрами лазерного источника.

1. T. I. Karu, Photochemistry and Photobiology. 52, (1990), p.1089-1098.

Источники термальных вод Азербайджана

А. Дж. Микаилова

Институт радиационных проблем НАНА, Баку, Азербайджан

Термальные воды – источники многих важных для человека минералов пресных вод, один из удивительных даров природы человеку. Они накапливаются в земной коре и движутся там различными способами по пустотам, порам и трещинам. Термальные источники классифицируются в зависимости от температуры, минерального состава и лечебных свойств.

В зависимости от температуры подземные воды подразделяются на холодные (ниже 20 °С), теплые (20–37 °С) и термальные (больше 42 °С).

Одним из наиболее известных и популярных качеств термальных вод являются их лечебные свойства. Циркулируя по земной коре, воды геотермальных источников растворяют в себе огромное количество минералов, благодаря которым и обладают удивительными целебными лечебными качествами. В лечебных целях используются так же радоновые воды ($Rn-5nKu/l$), в которых содержатся определенных количествах радон (Rn) и радий (Ra). Радон поступает в воды из горных пород в результате распада содержащегося в них радия. Довольно редко встречаются радиоактивные подземные воды. Лечебные свойства термальных источников классифицируются на гипертонические – эти воды, богатые солями, имеют тонизирующее воздействие, на гипотонические – выделяются благодаря низкому содержанию солей и на изотонические – успокаивающие воды.

Минеральный состав термальных вод отличается по составу минералов. Это обусловлено более глубоким проникновением, по сравнению с минеральными водами, в толщу земной коры. Термальные минеральные воды проявляются в местах явных и, возможно, скрытых магматических очагов палеоген-неогенового возраста (верхний эоцен-миоцен) и активных вулканических проявлений плиоцена и антропогена. Существующие, по-видимому, до сих пор в недрах магматические очаги питают подземные воды теплотой, обогащают их углекислым газом и некоторыми другими ингредиентами.

Термальные воды широко распространены на территории Азербайджана – Южный склон Большого Кавказа (30–50 °С), Губа-Хачмазская зона (40–85 °С), Апшеронский полуостров (40–90 °С), Горная часть Малого Кавказа (30–74 °С), Нахичеванская АР (40–50 °С), Талышский горный регион (30–50 °С), Ленкоранская равнина (44–64 °С), Кура-Аразская низменность (30–94 °С) и используются для нужд в различных областях хозяйства.

Изучение месторождений термальных минеральных вод Азербайджана, имеет важное научно-теоретическое и большое практическое значение, так как они могут быть широко использованы:

- в санаторно-курортном строительстве;
- в промышленном розливе;

- в химической промышленности;
- как источник тепловой энергии.

Целебные термальные воды Азербайджана излечивают широкий спектр заболеваний. Многие термальные и минеральные воды республики (Алаша, Истису, Дарыдаг, Сураханы, Туршсу, Гахаб и др.) кроме бальнеологических обладают и лекарственными свойствами, которые широко могут быть использованы в медицинской промышленности по производству антибиотиков и других лечебных средств (целебные соли).

Сканирующий рентгенофлуоресцентный анализ биологических образцов

А. А. Миндигулова¹, Я. В. Ракшун^{1, 2}, А. В. Ромащенко³, Д. С. Сороколетов^{1, 2}

¹ *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия*

² *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

³ *Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск, Россия*

В настоящее время развивается новая технология микропучковой терапии раковых образований. Одной из важнейших задач является усиление воздействия микропучков на поражённые участки, и сведение к минимуму – на здоровые. Один из способов решения этой задачи – введение рентгеноконтрастных элементов в поражённые ткани.

Предварительным исследованием растительного материала было получено, что минимальный предел обнаружения, который может быть получен на биологических образцах составляет порядка 1 ppm без использования дополнительных ухищрений.

В качестве экспериментального образца был выбран срез мозга лабораторной мыши, полученный после введения наночастиц платины. Исследования проводились на экспериментальной станции «РФА-СИ» ЦКП «СЦСТИ» на базе ускорителя ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН. Методика измерений подробно описана в работе [1]. В качестве индикатора вещества луковицы использовалась интенсивность флуоресцентного сигнала серы. Было получено пространственное распределение платины и серы.

Из полученных результатов могут быть сделаны следующие выводы: наблюдается связь между относительным содержанием серы и платины в веществе луковицы; на краях образца – в области анатомически связанной с носовой полостью, наблюдается повышенное содержание платины, которое носит распределённый характер.

1. Дарьин А. В., Ракшун Я. В. Методика выполнения измерений при проведении рентгенофлуоресцентного анализа с использованием рентгеновской концентрирующей оптики (поликапиллярные линзы). Научный вестник НГТУ. – 2013. - №2 (51).

Диагностика магнитных наночастиц, введенных в головной мозг крыс, по данным мессбауэровской спектроскопии

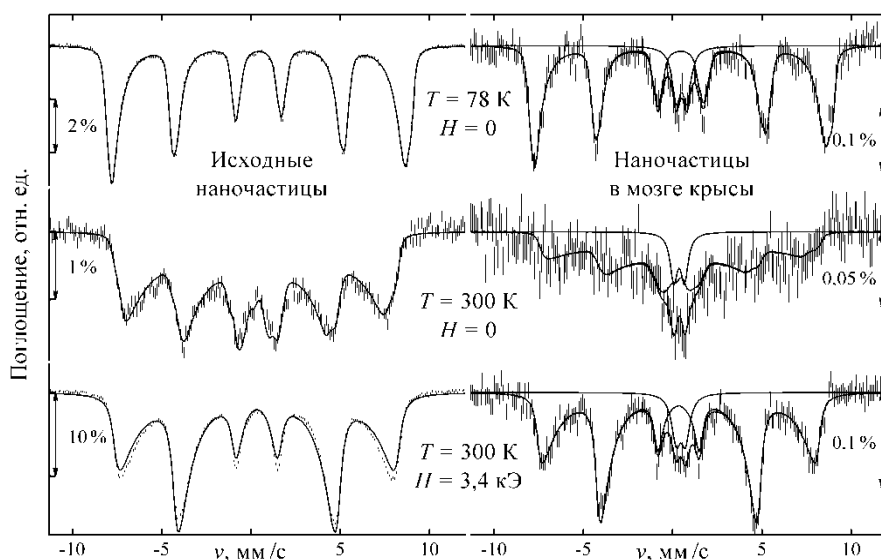
*И. Н. Мищенко¹, М. А. Чуев¹, Р. Р. Габбасов²,
В. М. Черепанов², М. А. Поликарпов²*

¹ Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В работе представлена методика диагностики железосодержащих наночастиц в живом организме на основе гамма-резонансной спектроскопии [1, 2]. На примере перераспределения инородных включений между головным мозгом и органами-фильтрами лабораторных крыс показано, что даже минимальный набор экспериментальных данных, включающий три мессбауэровских спектра поглощения, измеренных при разных температурах и во внешнем магнитном поле, позволяет надежно определять количественное содержание наночастиц и продуктов их трансформации на всех этапах деградации в живом организме. Информативность этой методики основана на совместном анализе экспериментальных данных в реалистичных моделях магнитной динамики наночастиц разной магнитной природы [3, 4], в том числе во внешнем магнитном поле [5] и с учётом сверхтонкого электрического квадрупольного взаимодействия [6].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-02-08171 А.



Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe (вертикальные штрихи) исходных наночастиц (слева) и мозга крыс через сутки после их транскраниального введения (справа) при разных температурах и во внешнем магнитном поле (сверху вниз). Сплошные линии представляют результаты совместной обработки данных: парциальные спектры наночастиц, вклад железосодержащего белка и результирующие спектры

1. М.А. Чуев et al., AIP Conf. Proc. 1311 (2010).
2. I. Mischenko, M. Chuev, J. Phys.: Conf. Ser. 345 (2012).
3. М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ, 95, 6 (2012).
4. М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ. 103, 3 (2016).
5. М.А. Чуев, ЖЭТФ. 141, 4 (2012).
6. М.А. Чуев, Письма в ЖЭТФ. 94, 4 (2011).

Гипотеза о причине доминирования в строении биообъектов элементов начальных периодов Периодической таблицы

*С. У. Норбаев¹, С. Е. Максимов², Л. Ю. Акопян³,
М. В. Коноплева³, Б. Л. Оксенгендлер²*

¹ *Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека, Ташкент, Узбекистан*

² *Научно-исследовательский центр химии и физики полимеров
при Национальном университете Узбекистана, Ташкент, Узбекистан*

³ *Узбекский государственный университет мировых языков, Ташкент, Узбекистан*

В проблеме элементного состава живой природы последнее время достаточно остро поставлен вопрос о превалянии элемента углерода (С) над элементом кремнием (Si). Это, действительно так, поскольку содержание Si в земной коре почти в триста раз превышает содержание С, несмотря на фактическую эквивалентность их электронной структуры. Г. Р. Иваницкий (УФН, 2011) полагает, что этот парадокс разрешается постоянным присутствием важного участника эволюционной игры – воды, которая более активно разрушает кремниевые цепочки, нежели углеродные. Нам, однако, представляется, что этот парадокс имеет гораздо более широкую экспериментальную базу: действительно, несложно усмотреть, что для всех элементов со сходной электронной структурой в составе живой природы всегда превалярует содержание элементов с меньшим номером периода (табл.).

Таблица. Содержание элементов – «лидеров» (мас. доля, %) в природе

Элемент	Символ	Распространение, %	
		В живой природе	В неживой природе
Водород	H	10,0	1,0
Натрий	Na	0,1	2,6
Углерод	C	10,5	0,2
Кремний	Si	0,15	30,0
Азот	N	2,5	0,1
Фосфор	P	0,95	0,08
Кислород	O	70,0	50,0
Сера	S	0,16	0,04

Как эти данные подпадают под гипотезу Г. Р. Иваницкого об унифицированной роли воды? Мы полагаем, что, кроме воды, в эволюции живого принципиальную роль всегда играла ионизирующая радиация, с особой эффективностью разрушая длинные молекулярные цепи в местах локализации элементов с наибольшим числом оболочек – это характерное свойство Оже-каскадов в молекулярных системах с начальной ионизацией глубоких оболочек. Это важнейшее обстоятельство отлично ложится на сравнительные цифры в таблице. С большой степенью правдоподобия, можно считать, что, кроме воды, «фильтром», отобравшим строение живой материи, явился радиационный Оже-эффект.

Анализ применимости модифицированной теории Каспара и Клуга для моделирования капсидов малых вирусов

В. В. Пимонов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В середине 20 века Д. Каспаром и А. Клугом была предложена модель структуры белковых вирусных оболочек с икосаэдрической симметрией [1]. В основе [1] лежит наложение развёртки икосаэдра на поверхность специфической гексагональной структуры с единственной правильной системой точек, обладающих тривиальной локальной симметрией. Ограничение на расположение белков только в подобных точках было наложено в [1] исходя из асимметричности данных молекул.

Подход [1] позволяет описывать структуру подавляющего большинства вирусов. Однако, структуры оболочек Satellite Tobacco Mosaic virus, L–A virus, Dengue virus, Chlorosome Vigna virus, Sindbis virus не укладываются в рамки [1], что обуславливает необходимость модификации данного подхода. Недавно было показано, что гладкие отображения простой гексагональной решетки на поверхность правильного икосаэдра также позволяют строить модели оболочек собранных из асимметричных структурных единиц [2], так как при таких отображениях локальная симметрия большинства позиций, попавших на поверхность оболочки падает вплоть до тривиальной.

Настоящая работа направлена на уточнение области применимости модифицированной теории [2] для моделирования оболочек малых вирусов. По известным литературным данным мною были установлены положения центров масс протеинов в оболочках и проведено сравнение этих положений с координатами позиций, предсказываемых в [2]. Для капсидов Satellite Tobacco Mosaic virus, Dengue virus, Chlorosome Vigna virus и Sindbis virus расхождения между координатами не превышало 20 % от среднего расстояния между соседними протеинами, что сопоставимо с разбросом литературных данных. В случае оболочки L–A вируса положения центров масс протеинов согласуются с [2] в 3 раза хуже.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, номер гранта 15-12-10004.

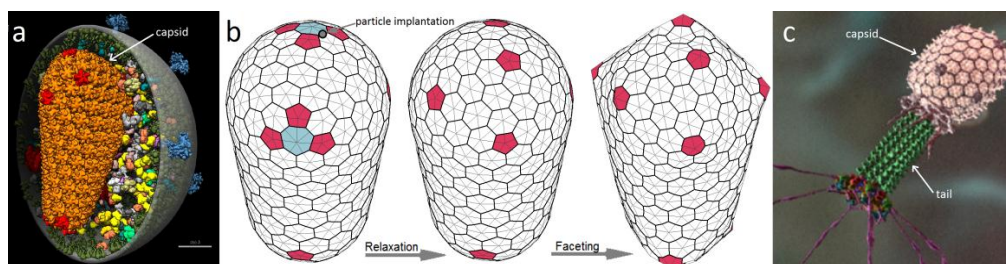
1. Caspar D.L.D., Klug A. Physical Principles in the Construction of Regular Viruses Physical Principles in the Construction of Regular Viruses. 1962. P. 1–24.
2. Rochal S.B. et al. Hidden symmetry of small spherical viruses and organization principles in “anomalous” and double-shelled capsid nanoassemblies. Royal Society of Chemistry, 2016.

Исследование закономерностей упаковки белков на конических и трубчатых поверхностях биологических нанобъектов

Д. С. Рошаль, С. Б. Рошаль

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Многие биологические объекты обладают скрытой или слегка нарушенной симметрией. Особенно интересно подобная симметрия проявляется в нанобъектах с небольшим количеством структурных единиц, то есть в вирусах. Их размер накладывает ограничение на объем генетической информации, поэтому большинство капсидов вирусов имеют строго определенную локально-периодическую икосаэдрическую структуру, построенную из одного типа белков. Однако капсид ВИЧ отличается полиморфизмом (может принимать трубчатую или коническую форму с разным углом раствора) и различным несимметричным расположением пентамеров (показанных красным на рис. а). Вследствие этого единая структурная модель капсида ВИЧ, позволяющая получать все возможные капсиды, до сих пор не была предложена. Для построения моделей возможных полиморфных форм капсида ВИЧ нами был предложен новый метод моделирования (см. рис. б) наиболее топологически совершенных двумерных кристаллов [1–2].



(a) – ВИЧ; (b) – получение бездефектной 2D упаковки частиц на изогнутых поверхностях, в том числе капсиды вирусов; (c) – бактериофаг T4

Мир вирусов полон необычных, скрытых симметрий. Например, трубчатые органеллы бактериофага T4 (хвост и хвостовой чехол) и капсиды вирусов из семейств *Roniviridae*, *Venyviridae* и *Virgaviridae* в силу низкой симметрии белковой упаковки (локально характеризуемой моноклинным порядком) не обязаны обладать, но обладают периодичностью вдоль своей оси. Нами рассмотрены причины появления осевой периодичности у разнообразных белковых трубчатых структур.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №15-12-10004).

1. D.S. Roshal, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, *Physica E*, **75**, 295 (2016).
2. D.S. Roshal, O.V. Konevtsova, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal *Phys. Rev. E*, **94**, 052605 (2016).

Исследование структурной организации хроматина в раковых клетках HeLa методом малоуглового рассеяния нейтронов

Е. Г. Яшина^{1,2}, D. Honecker³, М. В. Филатов², С. В. Григорьев^{1,2}

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

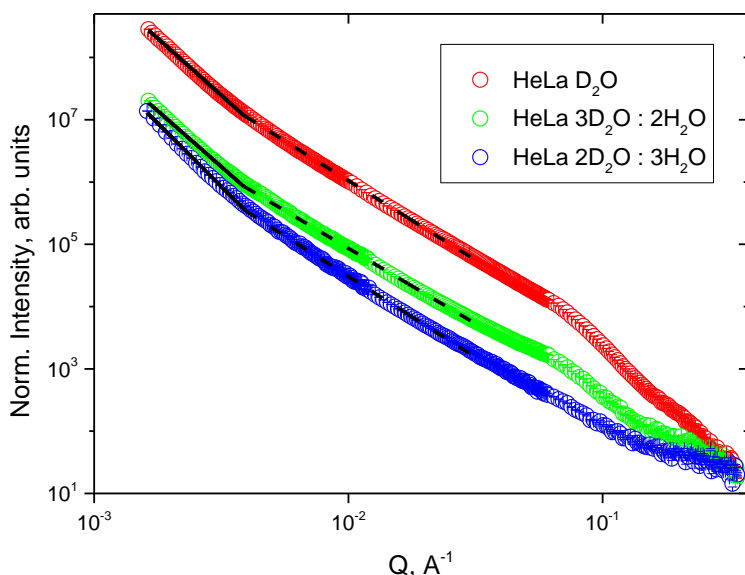
² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

Ядра раковых клеток HeLa были исследованы методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) на установке D11 (ILL, Grenoble, France). Измерения проводились с использованием техники вариации контраста, которая позволила различить рассеяние на коровых белках от рассеяния на самой нити ДНК. Ядра HeLa были помещены в три раствора, состоящих из разных смесей тяжелой и легкой воды:

- а) D₂O – для определения структуры хроматина как целого;
- б) D₂O:H₂O – 40:60 % – для определения структуры ДНК;
- в) D₂O:H₂O – 60:40 % – для определения структуры коровых белков.

Эксперименты по МУРН демонстрируют би-фрактальную структуру молекулы ДНК раковой клетки. Установлено, что закон рассеяния нейтронов на ядрах HeLa в диапазоне переданных импульсов от 0,03 Å⁻¹ до 0,005 Å⁻¹ описывается степенной функцией $I=AQ^{-D}$, с $D=2.5\pm 0.1$, что совпадает с организацией



хроматина здоровой клетки. В диапазоне переданных импульсов меньших, чем 0,005 Å⁻¹ закон рассеяния также описывается степенной функцией с параметром D близким к 3,7±0.1, что говорит о существенном отличии крупномасштабной организации хроматина ядер HeLa от крупномасштабной организации хроматина здоровой клетки [1].

*Малоугловое рассеяние нейтронов
на ядрах раковых клеток HeLa*

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 17-02-00313 А).

1. D.V. Lebedev, M.V. Filatov, A.I. Kuklin, A.Kh. Islamov, E. Kentzinger, R. Pantina, B.P. Toperverg, V.V. Isaev-Ivanov, FEBS Letters, 579 (2005), 1465–1468.

Оптические свойства квантовых дисков

Р. Г. Абасзаде¹, Г. Б. Ибрагимов¹, Б. Г. Ибрагимов¹, А. А. Алиев¹, Д. В. Якимчук²

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

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

В течение последних трех десятилетий возник большой интерес к исследованию низкоразмерных микроструктур, таких как квантовые ямы (КЯ), проволоки квантовых ям (ПКЯ), квантовые точки (КТ), квантовые диски, квантовые кольца и нанотрубки, т. к. эти микроструктуры позволяют открывать новые физические явления и имеют потенциальное технологическое применение. Теоретические исследования низкоразмерных полупроводниковых приборов открыло новое измерение в области изучения наноструктур, которое было усилено экспериментаторами после успехов в микроэлектронике, точнее методов выращивания структур [1]. Ограничение движения электрона возможно путем понижения размерности таким образом, что оно становится соизмеримым с длиной волны де Бройля и приводит к значительным изменениям как в микроскопических, так и макроскопических свойствах структур из-за квантования энергетических уровней. Это может быть эффективно использовано в новых электронных [2] и фотонных устройствах [3]. Квантовая точка является одной из совершенных разработанных наноструктур, которая открывает двери для создания квантового компьютера [4]; в последнее десятилетие различные геометрические вариации квантовых точек были предложены исследователями [5–6]. Большой интерес вызывает кольцевые структуры для теоретических [7–8] и экспериментальных исследований [9].

1. D. Granados and J. M. Garcia, Appl. Phys. Lett., 82 (2003) 2401-2403.
2. L. Zhuang, L. Guo and S. Y. Chou, Appl. Phys. Lett., 72 (1998) 1205-1207.
3. M. Kunz et al., Appl. Phys. A., 80 (2005) 1179-1182.
4. D. Loss and D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. A., 57 (1998) 120-126.
5. Y. Li, O. Voskoboynikov, C.P. Lee and S.M. Sze, Jour. App. Phys., 90 (2001) 6416-6420.
6. Y. Li, O. Voskoboynikov, C.P. Lee and S.M. Sze, Comp. Phys. Comm., 141 (2001) 66-72.
7. T. V. Bandos, A. Cantarero and A. Garcia-Cristobal, European Physical Journal B, 53, (2006) 99-108.
8. S. Bhattacharyya, S. Sen and N.R. Das, Proc. of the XIVth Int. Workshop on Physics of Semiconductor Devices (IWPSD-07), India (2007).

Бесщелевые состояния в бислое графена, состоящего из щелевых монослоев

Г. О. Абдуллаев¹, З. З. Алисултанов^{1, 2}

¹ Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

Исследование графена все еще остается одной из актуальных проблем физики конденсированного состояния. Одной из важных задач является исследование электронного спектра этого материала и различных структур на его основе, т. к. для реального приложения графена в электронике необходимы некоторые перестройки спектра, например, открытие щели.

Известно, что спектр бислоя графена, состоящего из идеальных монослоев является бесщелевым, в то время как в спектре бислоя составленного из щелевых монослоев появляется щель [1, 2]. В работе [3] предсказывается, что в щель в спектре бислоя может быть закрыта с помощью напряжения на затворе. В настоящей работе мы исследовали электронный спектр бислоя графена, состоящего из щелевых монослоев с противоположными знаками щелей. Мы показываем, что спектр такой системы является бесщелевым даже без внешнего электрического поля.

Гамильтониан задачи записывается следующим образом:

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \Delta & f(\mathbf{k}) & 0 & t_{\perp} \\ f^*(\mathbf{k}) & -\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta & f(\mathbf{k}) \\ t_{\perp} & 0 & f^*(\mathbf{k}) & \Delta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $f(\mathbf{k}) = \sum_j t \exp(i\mathbf{k}\delta_j)$, $\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$, $\delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$, $\delta_3 = \frac{a}{2}(-1, 0)$. Из (1) получаем следующее выражение для энергетического спектра

$$E_{\alpha\beta} = \alpha \frac{t_{\perp}}{2} + \beta \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + \left(\frac{t_{\perp}}{2} + \alpha\Delta\right)^2}, \quad (2)$$

где $\alpha, \beta = \pm 1$. Из (2) видно, что спектр является бесщелевым.

Мы исследовали случаи разных по модулю щелей, а также случай наличия внешнего электрического поля. Мы показали, что в случае разных по модулю щелей в монослоях, можно подобрать электрическое поле таким образом, чтобы результирующая щель в бислое исчезла. Интересно, что все эти эффекты сохраняются в самой строгой модели, когда учитываются все остальные интегралы перекрытия. Полученные результаты очень важны для практического применения графена, например, при создании светодиодов [4].

Авторы благодарят: грант президента РФ МК- МК-2130.2017.2, РФФИ № 15-02-03311а, РФФИ МКН-15-19-10049, фонд Дмитрия Зимина «Династия».

1. M. Mucha-Kruczynski, E. McCann, V. I. Fal'ko, *Semicond. Sci. Technol.* 25, 033001(2010).
2. E. McCann, M. Koshino, *Rep. Prog. Phys.*, 76 (2013), 056503.
3. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ*, **103**:9 (2016), 679–683.
4. Z.Z. Alisultanov, M.S. Reis, arXiv:1608.05388v1.

Изучение магнитных свойств сегнетокерамики $\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$

*Б. К. Абдулвахидов¹, С. А. Садыков¹, А. А. Амиров², С. Н. Каллаев²,
З. М. Омаров², К. Г. Абдулвахидов³, М. А. Сирота³, И. П. Дмитренко³,
Ю. В. Русалев³*

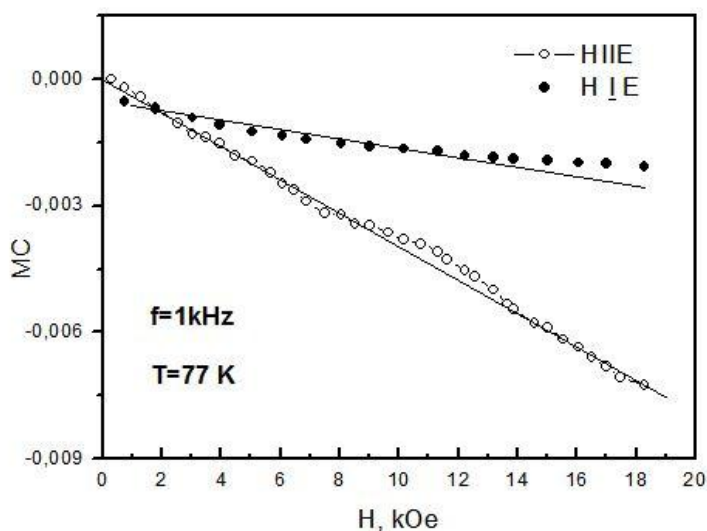
¹ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

² Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия

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

$\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ является классическим перовскитом с антиферромагнитным упорядочением, который имеет большой потенциал применения на практике, в частности в многослойных тонких пленках. Несмотря на широкие возможности применения этого материала, в литературе экспериментальные данные по нему практически не встречаются.

В рамках данной работы были проведены измерения магнитоэлектрического (МЭ) эффекта и магнитоемкости для мультиферроика $\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$. При комнатной температуре $\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ не имеет магнитного упорядочения и поэтому магнитоэлектрического упорядочения в при этой температуре не было обнаружено. При $T=77$ К для $\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ наблюдается линейная зависимость МЭ коэффициента и магнитоемкости, что свидетельствует о взаимодействии магнитной и электрической подсистем образца (см. рис.).



Магнитопольевые зависимости магнитоемкости (магнитодиелектрического эффекта) образца $\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ при $T=77$ К

Так как $\text{PbMn}_{1/2}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ относится к смешанным перовскитам с антиферромагнитным упорядочением, которое является более слабым типом магнитного упорядочения, чем ферромагнитное, а для соединений такого типа экспериментально чаще наблюдается линейный МЭ эффект, что и было обнаружено в настоящей работе.

Влияние продольного электрического поля на зоны Ландау в вейлевском полуметалле

З. З. Алисултанов^{1,2}, Н. А. Демиров³

¹ Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

³ Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Исследование вейлевских полуметаллов является одним из самых актуальных вопросов физики конденсированного состояния [1]. Эти материалы проявляют интересные свойства в магнитном поле. В настоящей работе мы исследовали зоны Ландау и квантовые осцилляции плотности состояний в вейлевском полуметалле в скрещенных магнитном и электрическом полях [2-4]. Мы получили выражение для энергетического спектра такой системы, используя три различных метода: алгебраический подход, метод лоренцевского сдвига и квазиклассический подход

$$\begin{aligned}\varepsilon_{n,p_x,p_z} &= \text{sgn}(n)\nu_F\sqrt{(1-\beta^2)^{3/2}2\hbar^2l_B^{-2}n+p_z^2(1-\beta^2)}+\nu_0p_x && \text{для } n \neq 0, \\ \varepsilon_{0,p_x,p_z} &= \pm\sqrt{(1-\beta^2)}\nu_Fp_z+\nu_0p_x && \text{для } n = 0.\end{aligned}$$

В этих формулах $\beta = cE/H\nu_F$, E , H есть напряженности электрического и магнитного полей, ν_F есть скорость Ферми носителей.

Интересно, что энергетический спектр, полученный в рамках квазиклассического подхода полностью совпадает с тем, что получен в рамках микроскопических подходов. Кроме того, мы исследовали классическое движение трехмерного дираковского фермиона в скрещенных полях. Мы показали, что электрическое поле приводит к кардинальной перестройке зон Ландау. Когда электрическое поле равно $\nu_F H/c$ происходит коллапс уровней Ландау, а движение становится полностью линейным. Однако, происходит это необычным образом. При этом условии волновая функция для объемных состояний обращается в нуль. Сохраняются только поверхностные состояния с $p_z = 0$. Это существенно изменит характер поверхностных состояний, называемых ферми-дугами. Электрическое поле влияет на характер осцилляций плотности состояний. Таким образом, электрическое является дополнительным параметром для существенной перестройки диамагнитных свойств вейлевских полуметаллов.

Авторы благодарят: грант президента РФ МК-2130.2017.2, РФФИ № 15-02-03311а, РФФИ МКН-15-19-10049, фонд Дмитрия Зимины «Династия».

1. O. Vafeek and A. Vishwanath, An. Rev. of Cond. Mat. Phys. 5, 83-112, (2014).
2. Z.Z. Alisultanov, M.S. Reis, EuroPhysLett. 113, 28004 (2016).
3. З.З. Алисултанов, Письма в ЖЭТФ 99(12), 813 (2014).
4. З.З. Алисултанов, Письма в ЖЭТФ 99(4), 258-262 (2014).

Расчеты из первых принципов электронного спектра и плотности состояний Ag_2S

Ю. И. Алыев^{1,2}, Н. А. Исмайылова¹, А. О. Даидамиров²,
Н. Т. Данг³, С. Г. Джабаров¹

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Азербайджанский государственный педагогический университет, Баку, Азербайджан*

³ *Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam*

Среди наиболее важных проблем физики твердого тела полиморфизм является одной из основных, при котором одна кристаллическая структура разрушается и в том месте, где началось разрушение, образуется зародыш кристалла новой модификации, имеющий абсолютно новую кристаллическую структуру. Несмотря на то, что химический состав остается постоянным, физико-механические свойства вновь образованной фазы полностью отличаются от свойств матричного кристалла. Одним из представителей таких кристаллических веществ являются двойные соединения составов AgS_2 , входящие в общую группу типа MeX_2 (где $\text{Me} = \text{Ag}, \text{Cu}$ и др., $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ и др.), обладающих разными физическими свойствами. В настоящей работе проведено исследование кристаллической структуры и спектр плотности состояний электронов соединения AgS_2 методом функциональной плотности.

В настоящей работе расчеты проводились из первых принципов на основе теории функционала плотности (DFT) с использованием программы Quantum Wise – Atomistix Tool Kit. В качестве псевдопотенциалов использовались сохраняющие нормы псевдопотенциалы FHI.

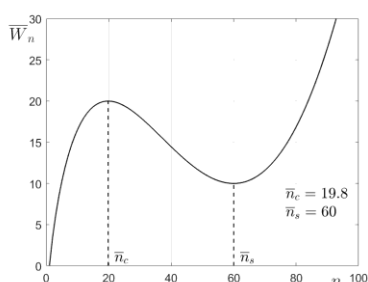
Проведенные нами расчеты в приближении GGA показали, что кристалл в модификации β - Ag_2S , показывает полупроводниковые свойства в то время как α - Ag_2S показывает полуметаллические свойства. Особенность зонной структуры α - Ag_2S полуметаллического материала является перекрытие потолка валентной зоны и дна зоны проводимости с энергией 0.16 эВ.

Исследование времен релаксации мицеллярных систем для квазикапельной модели сферической мицеллы

И. А. Бабинцев

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Ценная информация о физических и химических свойствах мицеллярных систем может быть получена из изучения кинетики агрегации и релаксации. Кинетика агрегации и мицеллярной релаксации в растворах ПАВ в случае молекулярного механизма агрегации, при котором изменение размера агрегата происходит путем присоединения или испускания только одной молекулы ПАВ, описывается системой разностных уравнений Беккера-Деринга. Роль молекулярного механизма широко обсуждалась, и его описание являлось предметом многих теоретических и экспериментальных работ [1–7]. В работе [8] были найдены времена релаксации мицеллярной системы с неионными ПАВ со сферическими мицеллами для широкого диапазона концентраций от первой критической концентрации (ККМ) до 30 ККМ путем решения линеаризованных уравнений Беккера-Деринга. Уравнения Беккера-Деринга



Работа агрегации \bar{W}_n как функция числа агрегации n для квазикапельной модели сферической мицеллы

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} = -(J_n - J_{n-1}), \quad n = 2, 3, \dots, \quad (1)$$

где $J_n \equiv a_n c_1 c_n - b_{n+1} c_{n+1}$ – поток агрегатов в пространстве чисел агрегации, c_n – концентрация агрегатов с числом агрегации n , a_n – коэффициенты присоединения мономера к агрегату с числом агрегации n , а b_n – коэффициент испускания мономера из агрегата с числом агрегации n . Так как в равновесии поток $\tilde{J}_n = 0$,

$$J_n \equiv a_n \left(c_1 c_n - \frac{\tilde{c}_n \tilde{c}_1}{\tilde{c}_{n+1}} c_{n+1} \right), \quad \text{где } \tilde{c}_n = \tilde{c}_1^n \exp(-\bar{W}_n) \text{ – равновесная}$$

концентрация агрегатов. В [8] для работы агрегации \bar{W}_n мы использовали капельную модель сферической мицеллы. Сейчас мы используем квазикапельную модель (рис.)

$$\bar{W}_n = \omega_1(n-1)^2 + \omega_2(n-1)^{3/2} + \omega_3(n-1) \quad (2)$$

при тех же полных концентрациях ПАВ и сравним, полученные результаты.

1. E. A. G. Aniansson and S. N. Wall, J. Phys. Chem. 78, 1024 (1974).
2. S. N. Wall and E. A. G. Aniansson, J. Phys. Chem. 84, 727 (1980).
3. M. Almgren, E. A. G. Aniansson, and K. Holmaler, Chem. Phys 19, 1 (1977).
4. M. Kahlweit and M. Teubner, Adv. Colloid Interface Sci. 13, 1 (1980).
5. R. Zana, «Dynamics in micellar solutions of surfactants», Chap. 3, p. 75. (2005)
6. A. K. Shchekin, F. M. Kuni, A. P. Grinin, and A. I. Rusanov, «Nucleation in micellization processes», Chap. 9, p. 312. (2005)
7. F. M. Kuni, A. I. Rusanov, A. K. Shchekin, and A. P. Grinin, Russ. J. Phys. Chem. 79, 833 (2005).
8. I. A. Babintsev, L. T. Adzhemyan, A. K. Shchekin, J. Chem. Phys. 137, 044902 (2012).

Holography and transport for superconductors

A.A. Blatov

Independent University of Moscow, Russia

Strongly coupled systems are not suitable to be described by perturbative approaches, in their we can't determine quasiparticles. They are nevertheless ubiquitous in nature, especially in condensed matter physics and in theory of superconductivity [1–3]. In this paper we apply the AdS/CFT correspondence for nonperturbative approaches in condensed matter physics. We start by analysing the “ordinary” 2+1 dimensional holographic superconductor where we only have a scalar field coupled to an Einstein-Maxwell theory in the bulk. After this we add corrections to the theory by higher derivative terms in the action which allows us to interpolate vortex excitations in the superconductor. In particular we find that we are able to tune the energy gap in the weakly coupled BCS and find that we can produce behaviour of conductivity at low frequencies. We study in detail their properties. Then we focus our attention on the transport properties of the CFT duals for analysis of the electric conductivity properties. We finally describe the relaxation effects on the holographic models for superconductivity.

1. S. A. Hartnoll, C. P. Herzog and G. T. Horowitz, “Building a Holographic Superconductor” *Phys. Rev. Lett.* (2008).
2. S. A. Hartnoll, C. P. Herzog and G. T. Horowitz, “Holographic Superconductors” *JHEP* (2008).
3. S. Sachdev, “What can gauge-gravity duality teach us about condensed matter physics?”, *Ann. Rev. of Cond. Mat. Phys.* (2011).

Моделирование методом Монте-Карло магнитной структуры аморфных сплавов на основе редкоземельных металлов

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфных Tb и Gd, а также аморфных сплавов (АС) $\text{Re}_x\text{Tb}_{100-x}$ ($x = 20, 29, 49, 59$ и 91 ат. %) и $\text{Re}_x\text{Gd}_{100-x}$ ($x = 12, 37, 61, 93$ ат. %), содержащие по 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследовались магнитные свойства построенных моделей. Для АС на основе тербия использован модельный гамильтониан:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - D \sum_i (\vec{n}_i \cdot \vec{S}_i)^2, \quad (1)$$

где J_{ij} – интеграл обменного взаимодействия; D – константа случайной анизотропии; \vec{S}_i – гейзенберговский спин; \vec{n}_i – единичный вектор, определяющий направление оси случайной анизотропии. Для АС на основе гадолиния гамильтониан был записан в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_2 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k), \quad (2)$$

где $J_1 = 45,7$ К – интеграл обменного взаимодействия между спинами в первой координационной сфере; $J_2 < 0$ – интеграл обменного взаимодействия между спинами во второй координационной сфере.

Для модели чистого аморфного Tb при всех значениях D/J_0 спиновые корреляционные функции $G(r)$ экспоненциально убывают с расстоянием. Построена зависимость длины корреляции ξ от величины D/J_0 . При $D/J_0 \geq 6$ длина корреляции составляет 4–5 диаметра атома Tb.

Для АС $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ при $x > 10$ ат. % спиновые корреляционные функции также экспоненциально убывают с расстоянием. Длина корреляции линейно увеличивается с ростом концентрации атомов Tb, что обусловлено линейным ростом константы анизотропии.

Рассчитаны спиновые корреляционные функции для модели аморфного Gd и АС Re-Gd при различных значениях $J_1/|J_2|$. В спин-стекольной фазе ($J_1/|J_2| = 9, 10$ и 11) функции $G(r)$ осциллируют на больших расстояниях, что свидетельствует как о положительных, так и отрицательных корреляциях в расположении магнитных моментов атомов Gd.

Различия в поведении спиновых корреляционных функций для АС на основе тербия и гадолиния свидетельствуют о различии магнитной структуры спиновых стекол со случайной анизотропией и с конкуренцией обменных взаимодействий.

Описание эффекта негативного термического расширения в трифториде скандия с помощью расчетов молекулярной динамики из первых принципов

Д. Боcharов¹, Ю. Рафальский¹, М. Крак², А. Кузьмин¹, Ю. Пуранс¹

¹ *Институт физики твердого тела Латвийского университета, Рига, Латвия*

² *Институт Пауля Шеррера, Филлиген, Швейцария*

Эффект негативного термического расширения (НТР) в твёрдых телах имеет большое промышленное значение для контроля термического расширения (ТР) материалов. Например, можно так подобрать материалы с негативным и позитивным ТР, что изготовленный из них композит будет иметь коэффициент ТР, близкий к нулю, что может быть использовано в высокоточных приборах.

В течение последнего десятилетия фториды различных металлов, в том числе ScF_3 , привлекли внимание как новый класс материалов с НТР [1]. ScF_3 имеет выраженное термическое расширение в широком диапазоне температур с 10 до 1000 К [2]. Твёрдые растворы, основанные на ScF_3 , в частности $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{F}_3$ и $\text{Sc}_{1-x}\text{Ti}_x\text{F}_3$, также являются интересными объектами для изучения из-за того, что обладают варьируемым НТР в зависимости от процентного соотношения входящих в них компонент раствора.

В данной работе эффект НТР в ScF_3 изучался с помощью расчётов молекулярной динамики из первых принципов с использованием программы CP2K [3]. Расчёты проводились для суперячеек с размерами от $2 \times 2 \times 2$ до $5 \times 5 \times 5$. Была оценена стабильность результатов в зависимости от размера суперячейки. На основании расчётов были получены зависимости средней постоянной решётки от температуры в статистическом ансамбле NpT (постоянно число частиц, давление и температура в системе), функция моментальных углов химической связи в ScF_3 и функции радиального распределения атомов в системе. Было показано, что расчёты качественно воспроизводят эффект НТР, и согласуются с результатами других теоретических работ [4]. Теоретические EXAFS спектры для К-края Sc, рассчитанные из данных молекулярной динамики с помощью методологии MD-EXAFS [5], хорошо согласуются с экспериментальными данными из работы [6].

1. Wang L. et al., Journal of Materiomics 1, 106 (2015).

2. B. K. Greve et al., J. Am. Chem. Soc. 132, 15496 (2010).

3. CP2K developers team, <http://www.cp2k.org>

4. P. Lazar, T. Bucko, and J. Hafner, Phys. Rev. B 92, 224302 (2015)

5. A. Kuzmin, R. A. Evarestov, J. Phys.: Condens. Matter., 21, 055401 (2009).

6. D. Bocharov, M. Krack, A. Kalinko, J. Purans, F. Rocca, S.E. Ali, and A. Kuzmin, J. Phys. Conf. Ser., 712, 012009 (2016); S. Piskunov, P.A. Žguncs, D. Bocharov, A. Kuzmin, J. Purans, A. Kalinko, R.A. Evarestov, S.E. Ali, and F. Rocca. - Phys. Rev. B, 93, 214101 (2016).

Фотоиндуцированный спин-поляризованный ток в интерферометре Ааронова – Бома

А. А. Григорькин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Интерес к квантовым кольцам обусловлен характерными для них эффектами, связанными с интерференцией электронных волновых функций. Интерференция при наличии спин-орбитального взаимодействия позволяет создавать эффективные спиновые фильтры на основе одиночных колец и их ансамблей. В работе рассматриваются спин-поляризованные токи, возникающие под действием циркулярно-поляризованного излучения в интерферометре Ааронова-Бома, – системе, состоящей из квантового кольца с двумя присоединенными к нему одномерными проводниками.

В интерферометре, обладающем центром инверсии, под действием излучения возможно возникновение спинового тока – упорядоченного движения электронных спинов при отсутствии переноса заряда [1]. Центросимметричный интерферометр так же может играть роль спинового фильтра в отношении протекающего через него баллистического тока. Недостаток этой системы связан с тем, что эффективная спиновая фильтрация возможна лишь при больших значениях магнитного потока через кольцо.

В данной работе рассматривается несимметричный интерферометр. Показано, что при малых магнитных потоках в общем случае на кольце можно найти такое взаимное положение контактов, при котором одна из поляризованных компонент баллистического тока обращается в ноль, что соответствует полной спиновой фильтрации. Интерферометр остается эффективным спиновым фильтром в весьма небольшом диапазоне углового расстояния между контактами.

В отсутствие постоянной разности потенциалов в интерферометре генерируется фотоиндуцированный ток, состоящий из двух поляризованных по спину компонент, величины которых в общем случае различны и зависят от углового расстояния между контактами. При этом внутри диапазона углов эффективной спиновой фильтрации имеется такое положение контактов, при котором компоненты фотоиндуцированного тока равны по величине и противоположны по направлению и ориентации спина. Таким образом, перенос заряда отсутствует и в проводниках течет спиновый ток.

1. Григорькин А.А., Дунаевский С.М., ФТТ, 58, 2014 (2016).

Об электронном торможении длинноволновых изгибных колебаний дислокаций при произвольной частоте

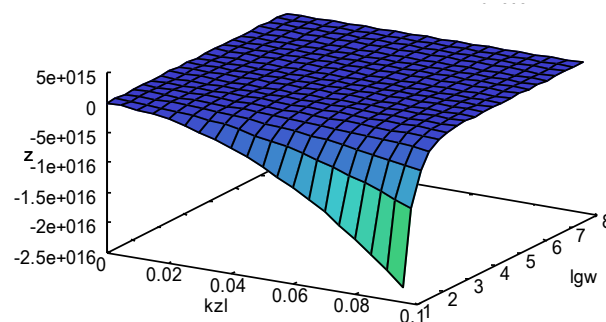
В. В. Дежин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

На основе предыдущих работ [1–3] исследовались длинноволновые изгибные колебания дислокации, лежащей вдоль оси Oz . Ограничивались случаем малых колебаний дислокации вблизи положения равновесия. Рассмотрен механизм электронного затухания колебаний дислокации в длинноволновом приближении ($|k_z l| \ll 1$), где k_z – компонента волнового вектора вдоль линии дислокации, l – длина свободного пробега электрона. Для мнимой части обратной обобщенной восприимчивости дислокации в диссипативном кристалле с учетом только старших слагаемых по степеням $k_z l$ получено

$$\text{Im} g^{-1}(k_z, \omega) = -\omega B_s - \omega B_e - \rho b_s^2 \omega \beta_s(k_z, \omega) - \rho b_e^2 \omega \beta_e(k_z, \omega).$$

Здесь ω – частота, B_s и B_e – коэффициенты торможения прямолинейных винтовой и краевой дислокаций, движущихся с постоянной скоростью, ρ – плотность материала, \vec{b}_s и \vec{b}_e – векторы Бюргера винтовой и краевой дислокаций, введены обозначения β_s и β_e для дополнительных вкладов в коэффициенты торможения винтовой и краевой дислокаций.



Зависимость вклада $\beta_s(\omega, k_z)$ от $\lg \omega$ и $k_z l$

На рисунке приведена зависимость дополнительного вклада в коэффициент торможения винтовой дислокации от $\lg \omega$ и $k_z l$. Аналогичная зависимость имеет место и для краевой дислокации.

1. Рощупкин А.М., Батаронов И.Л., Дежин В.В. Изв. РАН. Сер. Физическая. Т. 59, № 10. С. 12-16. (1995).
2. Дежин В.В. Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. Т. 21, вып. 3. С. 956-958. (2016).
3. Дежин В.В. Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. Т. 21, вып. 3. С. 959-961. (2016).

Фрактальная размерность нанокластеров золота и серебра на поверхности пленок того же металла

В. М. Самсонов, Е. В. Дьякова, Ю. В. Кузнецова

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

С использованием изображений, полученных методом атомно-силовой микроскопии, найдены и проанализированы фрактальные характеристики (кластерная фрактальная размерность и приведенная плотность) агрегатов нанокластеров Au и Ag на металлических пленках того же металла, полученных методом термовакuumного напыления на поверхности слюды (мусковита). Наши результаты подтверждают и обобщают сделанный ранее [1] вывод о том, что металлические нанокластеры на диэлектрических подложках могут иметь самоподобную фрактальную структуру. Найденные нами значения фрактальной размерности D и приведенная плотность ρ^* представляются вполне адекватными, причем значение $D = 1.6$, полученное для образцов нанокластеров Au первого типа на поверхности слюды, идеально согласуется со значением, рассчитанным нами по экспериментальным данным работы [1], относящимся к нанокластерам Au на поверхности кварца. Вместе с тем наши результаты демонстрируют наличие самоподобия для всей системы агрегатов металлических нанокластеров на диэлектрической подложке, а не только для отдельного кластера, как это утверждается в работе [1]. Так же стоит отметить, что путем искусственного создания деталей рельефа или активных центров можно будет в перспективе обеспечить контролируемое и воспроизводимое формирование агрегатов металлических нанокластеров на твердых поверхностях.

1. А. В. Белко, А. В. Никитин, Н. Д. Стрекаль, А. Е. Герман. Поверхн. 5, 11 (2009).

Эволюция дисклинаций в активных нематиках

Л. В. Ельникова

*Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Экзотические свойства «активной» мягкой материи (органических систем, коллоидов, мембран, жидких кристаллов (ЖК)) стимулируют ее изучение различными структурными методами на эксперименте и требуют развития теорий, взаимосвязанно описывающих их топологию и термодинамику. «Активные» ЖК являются достаточно новыми (по номенклатуре) и перспективными материалами, они могут находить широкое народнохозяйственное применение в сенсорах, композитных устройствах для спинтроники, являться основой индустриально значимых метаматериалов и пр. [1–3].

Среди разновидностей «активных» ЖК мы остановимся на коллоидных нематиках с линейными топологическими дефектами (дисклинациями), как неустойчивостями, индуцированными влиянием «активных пловцов» (например, в дисперсионной среде с бактериями). Как было замечено в [4], наблюдается аналогия искажения поля директора, связанная с поверхностным сцеплением, описываемая моделью Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) для фазового перехода в равновесной системе.

В то же время имеется результат [5] для случая взаимодействия топологических дефектов типа «дисклинация-бужум» в тех же самых каплях нематика, вычисленный в рамках калибровочной теории, построенной на континуальной модели Озена-Франка.

В настоящем исследовании представлена версия модели [5] для случая только линейных дефектов, дисклинаций, существующих и аннигилирующих в основном состоянии и в динамических условиях.

1. M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy et al., *Rev. Mod. Phys.* 85, 1143 (2013).
2. T. Vicsek, A. Czirok, E. Ben-Jacob et al., *Phys. Rev. Lett.* 75, 1226 (1995).
3. S. Zhou, A. Sokolov, O. D. Lavrentovich et al., *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111, 1265 (2014).
4. O. D. Lavrentovich, *ArXiv*: 1512.0498.
5. Л.В. Ельникова, *Жидкие кристаллы и их практическое использование* 15, 12 (2015).

Структура многослойной системы $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$ с нанометровой толщиной слоев

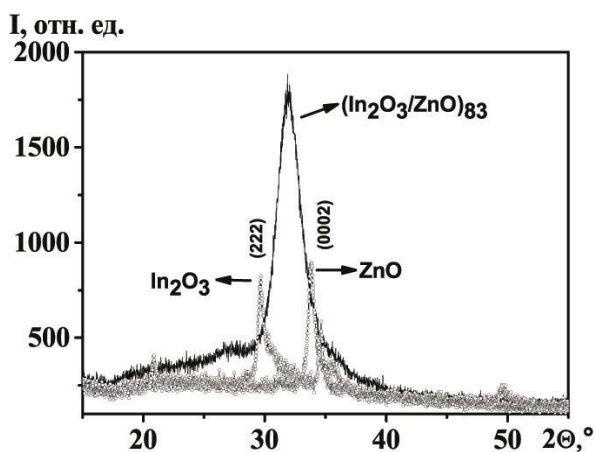
О. В. Жилова, И. В. Бабкина, А. В. Ситников, В. А. Макагонов, П. М. Хлоповских

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Слоистые тонкопленочные структуры с нанометровыми толщинами слоев, состоящие из различных полупроводниковых материалов, в настоящее время являются интересными объектами исследований для создания новых функциональных материалов с необычными свойствами. Кроме того, такая структура может проявлять более термостабильные электрические свойства, чем другие объекты с подобным масштабом неоднородностей.

Целью работы являлось исследовать структуру многослойной системы $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$.

Методом ионно-лучевого распыления двух мишеней на вращающуюся подложку были получены пленки широкозонных полупроводников In_2O_3 и ZnO и многослойные системы $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$ с толщинами слоя порядка одного нанометра.



Дифрактограмма пленок $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$, In_2O_3 и ZnO в исходном состоянии

На рисунке представлена рентгеновская дифракция от пленок In_2O_3 , ZnO и $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$ в исходном состоянии. Пики на рентгенограмме свидетельствуют о том, что исследуемые пленки имеют кристаллическую структуру. Видно, что дифракционный максимум образца $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$ находится между пиками (222) кубической структуры In_2O_3 и (0002) гексагональной структуры ZnO . Можно предположить, что эти плоскости сопрягаются друг с другом в пленке $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO})_{83}$. Деформация решетки вызвана эпитаксиальным псевдоморфизмом полученной многослойной системы.

Подтверждением предположения о наличии многослойной эпитаксиальной псевдоморфной структуры являются появление пиков сателлитов [1] и максимумов на малоугловых дифрактограммах.

1. Федосюк В. М. Многослойные магнитные структуры. Мн.: БГУ, 2000 – 197 с.

Влияния токовых флуктуаций на излучательные характеристики высокотемпературных сверхпроводниковых джозефсоновских линий передачи

М. Р. Жумаев, М. З. Шарипов

Бухарский инженерно-технологический институт, Бухара, Узбекистан

Частота излучения связанное с движущимся флаксонном

$$f = f_x u, \quad (1)$$

где $f_x = \frac{c}{2L}$ – характерная частота излучения джозефсоновских линиях передачи (ДЛП), c – скорость распространения электромагнитной волны в ДЛП, $u = \frac{g}{c}$, g – скорость флаксона.

Когда на флаксон действует чисто флуктуационный ток и диссипация, обусловленная туннелированием нормальных электронов поперек контакта скорость флаксона меняется случайным образом. Как известно, в таких случаях частоту излучения следует описывать с помощью следующих средних:

$$\langle f \rangle = f_x \langle |u| \rangle, \quad \langle f^2 \rangle = f_x^2 \langle |u|^2 \rangle, \quad Df = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2. \quad (2)$$

Следовательно для нахождения этих статистических характеристик частоты излучения необходимо определять функцию распределения скорости (ФРС) флаксонов.

Как было показано в работах [1-3], в рассматриваемом случае ФРС имеет вид:

$$\Phi(u) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} (1-u^2)^{-\frac{3}{2}} \exp[-au^2(1-u^2)^{-1}], \quad (3)$$

где $a = \frac{E_0}{2kT}$, $E_0 = \frac{I_c \Phi_0}{2\pi}$.

Как видно из выражения (3) ФРС флаксонов является негауссовой. Следовательно, дисперсия частоты излучения Df не будет пропорциональной тепловой энергии kT . Благодаря нелинейной зависимости от параметра a , в отличие от гауссовых флуктуаций, Df будет ограниченной даже при сильных флуктуациях тока. В этом проявляется ещё одна уникальная сторона флаксонов – как переносчика информации.

1. F.Kh. Abdullayev, M.R. Jumaev, E.N. Tsoy, Journ. of Techn. physics, V.45, p. 566-570, trans. Amer. Inst. of Physics (AIP) (2000).
2. M.R. Jumaev, NATO Adv. Res. Workshop on Nonl. and Disorder Theory and appl., Tashkent, Uzbekistan, 2-6 Oct. 2000, Proc. Publ. Kluwer Acad. Publishers, eds. F.Kh. Abdullayev, e.a., p. 411-414 (2001).
3. Мустахим Жумаев. Квантовый релятивистский идеальный газ и реликтовое излучение // Монография "LAP" LAMBERT Academic Publishing. Saarbrücken, Deutschland. 2016. - С. 249.

Исследование влияния борной кислоты на структурные свойства Ni-нанотрубок

М. А. Ибрагимова¹, А. Л. Козловский^{1, 2}

¹ *Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан*

² *Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

Одной из проблем развития современных технологий синтеза наноструктур является контроль за процессами нуклеации частиц. При этом существует необходимость контролировать поведение процессов электролиза и получения наноструктур с заданными свойствами. Решением данной проблемы является получение знаний природы адсорбированных и восстанавливающихся на электродах наночастиц и определения характера влияния различных добавок на изменение структуры и элементного состава наноструктур.

Введение различных добавок в электролит позволяет синтезировать наноструктуры без существенных изменений характера и скорости электролитических процессов.

В работе рассмотрено влияние добавки борной кислоты в раствор электролита для синтеза Ni – нанотрубок методом электрохимического осаждения. Добавление борной кислоты в раствор электролита в качестве буферной кислоты служит для снижения концентрации гидроксидов никеля и упорядочению металлической структуры.

Полученные результаты вносят вклад в теорию синтеза наноструктур с упорядоченной структурой, а также контролируемым элементным составом кристаллической решёткой.

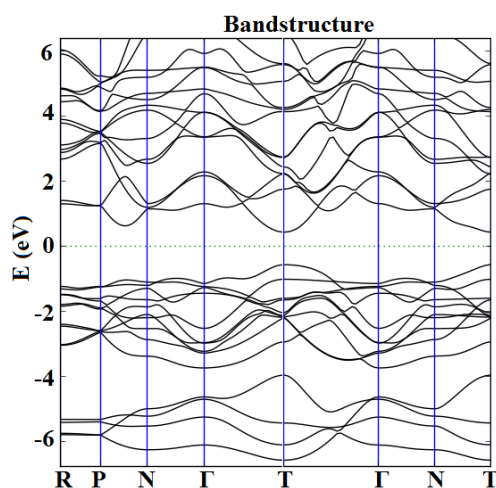
First principle calculation of the electronic structure, dos and effective mass TlInSe₂

N.A. Ismayilova¹, G.S. Orudzhev^{1, 2}

¹ *Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan*

² *Azerbaijan Technical University, Baku, Azerbaijan*

The electronic structure, effective mass are calculated for tetragonal TlInSe₂ from first principle in the framework of DFT [1]. The electronic structure of TlInSe₂ have been investigated by Quantum Wise within GGA [2]. The BLYP (Becke-Lee-Yang-Parr) [3] exchange-correlation functionals were used in our calculations. Calculated band structure figure 1 has been shown that the BLYP correlation with combine GGA is able to find the band gap ($E_g = 1.01$ eV) comparable with experimental data [4–7]. Both the valence band maximum and conduction band minimum located at the *T* point of the Brillouin zone. The results on the electron and hole effective masses at the T point are summarized in table1. Where m_{\parallel}^* (m_{\perp}^*) the effective mass in the parallel (perpendicular) direction to the tetragonal *c*- axis of the crystal cell. It can be clearly seen from table that the electron effective masses are fairly isotropic, while the hole effective masses show strong anisotropy: $m_{h,\parallel}^*/m_{h,\perp}^* = 4.7$. The nature of these kinds of anisotropy of holes once confirms the fact about that the top of valence band maximum originates from states of TI atoms. Really the nature of anisotropy for 2Se - In - 2Se chains would be contrary, the movement of the charge carriers should be much easier in direction of the chains, contradistinction in perpendicular direction to the chains.



*Calculated electronic structure of TlInSe₂ by GGA with BLYP correlation.
The zero of the energy scale shows the position of the Fermi level*

Прохождение быстрых электронов через диэлектрические каналы

А. А. Каплий, К. А. Вохмянина, В. С. Сотникова

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Изучение механизма прохождения быстрых электронов через диэлектрические каналы представляет собой актуальную задачу в связи с потенциальной возможностью создания малогабаритного и достаточно простого в изготовлении и использовании устройства, позволяющего эффективно управлять пучками заряженных частиц. В настоящее время проводится ряд экспериментов по изучению прохождения электронов через диэлектрические каналы [1–5].

В данной работе исследована возможность управления спектрально-угловыми характеристиками пучков заряженных частиц, а также проведены исследования по изучению бесконтактного прохождения быстрых электронов через диэлектрические каналы различной формы.

Результаты данного исследования основаны на открытом сравнительно недавно эффекте управления пространственными характеристиками пучков положительно заряженных частиц диэлектрическими поверхностями. Основой эффекта является изменение физических свойств материала поверхности при воздействии на нее пучка частиц. Проведенные эксперименты демонстрируют возможность фокусировки быстрых электронов с помощью диэлектрических каналов различной длины и разных диаметров входного и выходного отверстий. Экспериментально показана зависимость значения величины тока пучка электронов, прошедших через канал, от времени и от угла наклона канала относительно оси пучка. Также показана возможность реализации условий бесконтактного движения заряженных частиц через диэлектрический канал.

1. S. J. Wickramarachchi, B. S. Dassanayake, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 269, 1248-1252 (2011).
2. W. Wang, J. Chen, D. Y. Yu, et al., Phys. Scr. T 144, 014023 (2011).
3. S. J. Wickramarachchi, B. S. Dassanayake, et al., Phys. Scr. T 156, 014057 (2013).
4. S. J. Wickramarachchi, T. Ikeda, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 317, 101-104 (2013).
5. K.A.Vokhmyanina, G.P.Pokhil, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 355, 307 (2015).

Модификация структуры нанотрубок с применением ионизирующего излучения

А. Л. Козловский^{1, 2}, Д. И. Шлимас^{1, 2}, М. В. Здоровец^{1, 2, 3}

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

³ Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Облучение различных видов материалов пучками высокоэнергетичных ионов является высокоэффективным способом контролируемой модификации структурных, оптических и электрических свойств в современном материаловедении.

В работе с использованием методики электрохимического шаблонного синтеза получены массивы металлических наноструктур на основе никеля в форме полых цилиндров. Диаметр нанотрубок задавали размерностью исходной полимерной матрицы, что позволило получить массивы, состоящие из индивидуально стоящих нанотрубок. Модификация кристаллической структуры нанотрубок была проведена на ускорителе ДЦ – 60 пучками тяжелых ионов ксенона и углерода. Выявлены зависимости изменения проводящих свойств и кристаллической структуры от дозы облучения.

Изучение процесса формирования нанотрубок в порах полимерных матриц

А. Л. Козловский^{1, 2}, В. Я. Дик³, К. К. Кадыржанов¹

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

³ Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

Анализ последних достижений и тенденций развития нанотехнологий позволяет сделать вывод о том, что наиболее перспективными наноматериалами для практического применения являются металлические магнитные нанотрубки с упорядоченной структурой. Несмотря на огромное количество работ, посвященных различным способам получения наноструктур, вопрос о начальных этапах формирования нанотрубок в процессе электрохимического синтеза остается открытым.

Настоящее исследование посвящено изучению процессов нуклеации и стадий формирования стенок нанотрубок в порах полимерных матриц на основе ПЭТФ. Установлена зависимость скорости нуклеации частиц и последующего формирования стенок трубок от времени и условий осаждения.

Влияние аморфной подложки на теплопроводность графена

С. В. Коняхин^{1,2}, О. И. Утесов³, И. Н. Тертеров¹, А. В. Налитов⁴

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

⁴ School of Physics and Astronomy, University of Southampton, Southampton, UK

В данной работе развивается теория теплопроводности в графене с учетом рассеяния фононов на беспорядке в потенциале, вызванном влиянием аморфной подложки. Спектры акустических out-of-plane (ZA) и in-plane (LA и TA) фононов были получены в рамках формализма функции Грина. Параметры для теории возмущений были получены при помощи метода молекулярной динамики. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие графен-аморфный SiO₂ описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, параметры для которого были взяты из работы [1]. Полученные из спектров времена жизни фононов были использованы для расчёта теплопроводности при помощи транспортного уравнения Больцмана в приближении времени релаксации. Времена жизни фононов, соответствующие ангармоническим процессам распада, были взяты из работ [2,3]. Также учитывался вклад от рассеяния фононов на границах образца.

Было показано, что влияние подложки приводит к локализации и затуханию ZA фононов, и, таким образом, их выпадению из процессов переноса тепла [4]. Для LA и TA фононов вклад аморфной подложки в затухание оказывается сравним с вкладом от ангармонических процессов. Как следствие, общая теплопроводность графена уменьшается с 3000 Втм⁻¹К⁻¹ до значений порядка 500 Втм⁻¹К⁻¹. Данные предсказания согласуются с данными эксперимента по измерению теплопроводности графена на аморфном SiO₂ [5].

Работа поддержана фондом РФФ: проект 16-19-00075 (поддержка С.К.) и проект 14-22-00281 (поддержка О.У.).

1. B. Qiu and X. Ruan, Reduction of spectral phonon relaxation times from suspended to supported graphene, Appl. Phys. Lett. 100, 193101 (2012).
2. A. Alofi and G. P. Srivastava, Phonon conductivity in graphene, J. Appl. Phys. 112, 013517 (2012).
3. D. Singh, J. Y. Murthy, and T. S. Fisher, Spectral Phonon Conduction and Dominant Scattering Pathways in Graphene, J. Appl. Phys. 110, 094312 (2011).
4. S. V. Koniakhin, O. I. Utesov, I. N. Terterov, and A. V. Nalitov. Substrate-induced reduction of graphene thermal conductivity. Phys. Rev. B 95, 045418 (2017).
5. J. H. Seol, I. Jo, A. L. Moore, L. Lindsay, Z. H. Aitken, M. T. Pettes, X. Li, Z. Yao, R. Huang, D. Broido et al., Two-dimensional phonon transport in supported graphene, Science 328, 213 (2010).

Нелинейные восприимчивости кубических ферромагнетиков вблизи точки Кюри

А. Я. Кудлис, А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В критической области тепловые флуктуации намагниченности могут менять эффективную анизотропию кубического ферромагнетика. Здесь имеется в виду анизотропия нелинейных восприимчивостей кристалла. Существуют различные режимы критического поведения кубических ферромагнетиков. Реализация того или иного из них зависит, в частности, от числа компонент (размерности) параметра порядка N . Если N больше граничного значения N_c , при подходе к критической точке ферромагнетик остается анизотропным. Многопетлевые ренормгрупповые (РГ) расчеты показали, что значение граничной размерности $N_c < 3$, но весьма близко к 3 [1, 2]. Очевидно, что из-за численной близости N_c к физическому значению $N = 3$ измерение критических индексов кубических ферромагнетиков, практически совпадающих с индексами ферромагнетиков гейзенберговского типа, не позволит определить, какой из режимов критического поведения реализуется на практике. Было показано [3] однако, что определить тип критического поведения экспериментально все же можно, но для этого необходимо измерять нелинейные восприимчивости кристалла.

В докладе получены численные оценки универсальных эффективных констант связи u_6 , q_6 , v_6 , а также величина относительной анизотропии нелинейной восприимчивости шестого порядка для трехмерной кубической модели в точке Кюри. За основу взяты шестипетлевые РГ разложения для функций Гелл-Манна-Лоу [2], четырехпетлевые РГ ряды для u_6 , q_6 , v_6 [3] и техника псевдо- ϵ -разложения, показавшая высокую численную эффективность в задачах подобного рода [4–6]. Суммирование полученных псевдо- ϵ -разложений посредством различных методов привело к численным результатам, заметно отличающимся от полученных ранее РГ оценок [3]. Метод Паде-Бореля, в частности, дал для u_6 , q_6 , v_6 и параметра анизотропии шестого порядка значения 1.015, 0.295, 0.0058 и 0.170. Последний результат подтверждает вывод о том, что анизотропное критическое поведение вполне может быть обнаружено в физических и компьютерных экспериментах.

1. D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B 61, 15130 (2000).
2. J. M. Carmona, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B 61, 15136 (2000).
3. D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B 64, 094407 (2001).
4. A. Kudlis and A. I. Sokolov, Phys. Rev. E 94, 042107 (2016).
5. A. I. Sokolov and M. A. Nikitina, Phys. Rev. E 89, 052127 (2014).
6. А. Кудлис, А. И. Соколов, ТМФ, 190, №2 (2017).

***Ab initio* исследование электронной структуры низкоразмерной системы «графен – железо – никель»**

Е. Ю. Лобанова^{1, 2}, Е. К. Михайленко^{1, 2}, С. М. Дунаевский^{1, 3}, И. И. Пронин²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Графен является очень привлекательным материалом для множества технологических применений [1, 2]. Поскольку формирование ферромагнитных слоев под графеном представляет особый интерес для развития спинтроники, интеркаляция графена железом и кобальтом стала объектом активных исследований в последние годы. Одной из таких систем является интерфейс Gr/Fe/Ni(111). Его свойства недостаточно хорошо изучены экспериментально, а теоретические расчеты проведены только для одного и двух слоёв железа, локализованных между никелем и графеном [3]. Целью данной работы было изучение электронной структуры системы Gr/Fe/Ni(111) в более широком диапазоне количества слоев интеркалированного железа.

Расчеты были проведены из первых принципов с использованием метода функционала плотности. Поверхность Ni(111) моделировалась гексагональной решеткой Браве с постоянной, равной 2,42 Å. Пленки железа и углерода на поверхности никеля моделировались с той же постоянной решетки. Расстояние между никелем и графеном в соответствии с данными работы [4] было выбрано равным 2,13 Å. Ширина вакуумного зазора была выбрана равной 5 Å. Положение атомов углерода на никеле и железе моделировалось в конфигурации “top-fcc”.

Для системы Gr/Fe/Ni(111) было проведено сравнение полных энергий для конфигураций с одним монослоем железа над и под графеном. Энергия интерфейса Fe/Gr/Ni(111) оказалась выше, чем у интерфейса Gr/Fe/Ni(111), на 2 эВ, что позволяет сделать вывод о том, что процесс интеркаляции железа под графен является энергетически выгодным. Далее были проведены расчеты зонной энергетической структуры, полной и парциальных плотностей состояний для систем Gr/nMLFe/Ni(111) для $n = 1, 3, 5, 7$. Результаты расчетов оказались в согласии с недавно опубликованными экспериментальными данными [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-02-00387) и Российско-Германской лаборатории в HZB BESSY. Теоретические расчеты были проведены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ.

1. K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, Nature 438, 197 (2005).
2. A. Varykhalov, J. Sanchez-Barriga, D. Marchenko, P. Hlawenka, P.S. Mandal & O. Rader, Nature Comm. 6, 7610 (2015).
3. M. Weser, E. N. Voloshina, K. Horn, and Y. S. Dedkov, Phys. Chem. Chem. Phys. 1 7534 (2011).
4. S.M. Kozlov, F. Vines, A. Gorling. Bonding mechanisms of graphene on metal surfaces, J. Phys. Chem. C. 116, 7360 (2012).
5. G.S. Grebenyuk, O.Yu. Vilkov, A.G. Rybkin et al., Appl. Surf. Sci. 392, 715 (2017).

Дисперсионные характеристики поверхностных магнитостатических волн в тонких пленках никеля

П. А. Макаров¹, В. И. Щеглов²

¹ Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина,
Сыктывкар, Россия

² Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия

Вопрос о распространении в тонких магнитных плёнках поверхностных магнитостатических волн (ПМСВ) и их характеристиках является принципиально важным при разработке СВЧ-устройств обработки данных [1]. В том числе ведутся исследования о применимости ПМСВ в качестве средства передачи информации в цифровых логических схемах [2, 3]. Ключевыми вопросами при этом являются минимизация потерь энергии, установление изменений в спектре и характере дисперсии ПМСВ под влиянием электронной проводимости в металлических плёнках.

В данной работе, на основе разработанной модели⁴ были получены дисперсионные соотношения для ПМСВ, распространяющихся в плоскости тонких плёнок никеля под произвольными углами относительно направления внешнего магнитного поля.

На основе полученных дисперсионных соотношений для действительной и мнимой частей волнового числа при учете затухания и направления распространения волны установлено, что имеет место существенное ограничение дисперсионных кривых как по волновому числу, так и по частоте. Также выявлено, что с ростом внешнего магнитного поля спектр ПМСВ сужается и смещается в ВЧ-область, угловой сектор распространения волн и максимальное волновое число сокращаются. Выполнены численные оценки группой скорости волн при различных ориентациях волнового вектора относительно направления поля.

1. Wang, Zhao, Khitun, Thin Solid Films. 517, 184-190, (2008).

2. Khitun, Wang, Superlattices and Microstructures. 38, 184-200, (2005).

3. Kwon, Mukherjee et al., Appl. Phys. A: Mat. S. and Proc. 111, 369-378, (2013).

4. Келлер, Макаров, Шавров, Щеглов, ЖРЭ. 2, (2016).

Оптический фурье-преобразователь двумерных объектов как инструмент определения фрактальной размерности

М. Д. Матасов¹, С. В. Григорьев¹, В. Н. Петров², И. А. Шевкунов²

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*

Основным параметром, свидетельствующим о том, что та или иная структура, представляет собой фрактал, является размерность Хаусдорфа [1]. Нами предлагается способ, в основу которого положен закон зависимости интенсивности рассеянного излучения от волнового числа переданного импульса [2].

$$I(Q) \sim Q^{-D}$$

В этом выражении показатели степени стоит фрактальная размерность D . Как известно спектр рассеянного излучения является квадратом модуля прямого преобразования Фурье, взятого от функции рассеивающей плотности $I(Q) \sim |F|^2$. В случае если рассеивающий объект является двумерным, и расположен перпендикулярно потоку излучения, то спектр интенсивности рассеянного излучения будет являться квадратом модуля двумерного прямого преобразования Фурье, взятого от плоского изображения двумерного объекта.

Для получения зависимости $I(Q)$ экспериментально нами предложено реализовать Фурье-оптическую схему.

В данной схеме плоско-параллельный волновой фронт, коллимированного пучка света, попадает перпендикулярно плоскости изучаемой двумерной фрактальной структуры. Непосредственно сразу за исследуемым объектом устанавливается собирающая линза, в фокусе которой расположен детектор. В фокальной плоскости линзы распределение интенсивности прошедшего через неё света представляет собой квадрат модуля искомого преобразования Фурье. В итоге, на детекторе, который находится в фокальной плоскости линзы, мы получаем интерференционную картину из дальней зоны, которая нам и требовалась. Проводя усреднение по углу, отождествляя расстояние в направлении от центра интерференционной картины к краям с переданным импульсом, мы получаем зависимость интенсивности рассеянного излучения от переданного импульса $I(Q)$. Построив в двойном логарифмическом масштабе полученный спектр, по углу наклона прямой к оси волновых чисел можно найти размерность структуры.

1. B. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York (1983).

2. J. Teixeira J. Appl. Cryst. 21 (1988), 781-785.

Магнитные свойства ультратонких пленок Са-манганитов на подложке SrTiO₃

Е. К. Михайленко¹, С. М. Дунаевский^{2, 1}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Манганиты представляют собой соединения со структурой перовскита, магнитные свойства которых меняются в зависимости от уровня легирования x [1, 2]. Наибольший интерес в настоящее время вызывают исследования ультратонких плёнок этих материалов [3–5], а также гетеропереходов на их основе. Благодаря наличию поверхностей раздела, физические свойства пленок отличаются от объемных свойств кристаллов, что необходимо учитывать при создании различных элементов спинтроники. В настоящей работе методом теории функционала плотности в приближениях LDA и LDA+U исследуются магнитные свойства ультратонких слоёв типа (100) нелегированных манганитов кальция CaMnO₃, расположенных на подложке SrTiO₃ (структура перовскита). В работе представлены результаты *ab-initio* расчётов, выполненных в рамках метода псевдопотенциала, реализуемого программным комплексом Quantum Espresso. Вычисления выполнялись для суперячеек, моделирующих объём, свободные поверхности и поверхности раздела (100) структур Ca _{n} Mn _{$n+1$} O _{$3n+1$} :Sr _{m} Ti _{$m+1$} O _{$3m+1$} , где $n=1-4$, $m=1-4$, разделённых вакуумным промежутком ~ 1.1 nm. Вычислены полные энергии возможных магнитных состояний, соответствующих случаям F, A, C и G типов магнитного упорядочения в объёме и у поверхности раздела гетероструктур. Структурная оптимизация геометрии ячейки проводилась методом сопряжённого градиента. Результаты расчётов позволяют сделать вывод об отсутствии «мёртвых слоёв» (“dead layers”) [6] на поверхности манганитов, а также определить наиболее энергетически выгодные антиферромагнитные упорядочения. Наиболее интересным результатом расчетов является обнаружение в таких гетероструктурах полностью поляризованных состояний вблизи уровня Ферми, вклад в который создаётся атомами Mn.

1. G. H. Jonker, J.H. Van Santen, Physica (Amsterdam) 16, 337 (1950).
2. J.H. Van Santen, G. H. Jonker, Physica (Amsterdam) 16, 599 (1950).
3. J. Stahn et al., Phys. Rev. B 71, 140509(R) (2005).
4. Hoffmann et al., Phys. Rev. B 72, 140407(R) (2005).
5. J. Chakhalian et al., Nature Phys. 2, 244 (2006).
6. M. J. Calderón, L. Brey, and F. Guinea, Phys. Rev. B 60, 6698(1999).

Медленные осцилляции поперечного магнетосопротивления в слоистых материалах в слабом магнитном поле

Т. И. Могилюк, П. Д. Григорьев

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Медленные осцилляция магнетосопротивления являются удобным инструментом для измерения свойств электронной структуры в квазидвумерных металлах. Нашей целью является теоретическое описание осцилляций поперечного магнетосопротивления в слоистых металлах с интегралом межслоевого туннелирования электронов $t_z > \hbar\omega_c$, где $\hbar\omega_c$ – расстояние между уровнями Ландау. Рассчитан тензор плоскостной проводимости, содержащий как квантовые, так и медленные [1, 2] осцилляции магнетосопротивления. Взаимодействием между электронами пренебрегается, а учитывается только их рассеяние на примесях. Обсуждаются обобщения на случай многозонных проводников.

1. P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B 67, 144401, 2003.

2. P.D. Grigoriev, M.M. Korshunov, T.I. Mogilyuk, J. Superconductivity and Novel Magnetism, 29(4), 1127 (2016).

***Ab initio* расчет кристаллической структуры и фононного спектра ортосиликата Lu_2SiO_5**

Д. В. Назипов, А. Е. Никифоров

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Допированные редкоземельными ионами монокристаллические ортосиликаты R_2SiO_5 , где R – редкоземельный ион, являются перспективными лазерными материалами, детекторами гамма лучей и используются в позитронно-эмиссионной томографии [1]. Данные соединения имеют низкосимметричную моноклинную $C2/c$ структуру и сложны для исследования с экспериментальной точки зрения. В работе [2] впервые экспериментально исследован спектр комбинационного рассеяния света монокристалла Lu_2SiO_5 и проведена идентификация спектра.

В данной работе проведен первопринципный расчет кристаллической структуры и фононного спектра ортосиликата лутеция в рамках теории функционала плотности (DFT) используя гибридные функционалы. Расчеты проведены в программном пакете CRYSTAL14 [3].

Получены результаты в хорошем согласии с экспериментом как для всех параметров кристаллической структуры, так и для ширины запрещенной щели. Рассчитан полный набор фундаментальных колебаний, их частоты, типы и интенсивности в инфракрасном спектре и спектре КРС. Результаты сравниваются с имеющимися в литературе экспериментальными данными. Проведен анализ фононного спектра методом изотопического замещения.

1. C.L. Melcher, L.A. Eriksson, M. Aykac, F. Bauer, C. Williams, M. Loope, M. Schmand, in: S. Tavernier et al. (Eds.), Radiation Detectors for Medical Applications, Springer, Berlin, pp. 243–257, (2006).
2. Y.K. Voron'ko, A.A. Sobol, V.E. Shukshin, A.I. Zagumennyi, Y.D. Zavartsev, S.A. koutovoi. Spontaneous Raman spectra of the crystalline, molten and vitreous rare-earth oxyorthosilicates. Optical Materials 33, 1331-1337 (2011).
3. URL: <http://www.crystal.unito.it/>

Фрактальный нанокатализ

*Н. Н. Никифорова¹, В. Н. Никифоров², Б. Аскарров¹, С. Е. Максимов¹,
И. Н. Нурғалиев¹, Б. Л. Оксенгендлер¹*

¹ Научно-исследовательский центр химии и физики полимеров
при Национальном университете Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

При изучении физико-химических свойств наночастиц был обнаружен комплекс свойств, объединённых термином «нанокатализ». Показателен в этом смысле Au-нанокатализ, макроэффект которого состоит в том, что «наношарики» Au при своём уменьшении до радиуса $R \leq 6$ нм превращаются в сильнейшие нанокатализаторы [1]. Модель этого явления была построена в [2] и связана с появлением при $R \leq 6$ нм и модификацией Таммовских состояний (ТС) на наночастицах Au. Эти ТС, проникая в области антисвязи молекулы O_2 , уменьшают энергию диссоциации на величину:

$$\Delta Q = \beta \Psi(R), \quad (1)$$

где β – коэффициент пропорциональности (индекс свободной валентности Коулсона), $\Psi(R)$ – некая сложная функция, такая, что $d[\Psi(R)]/dR < 0$. Если перейти к случаю гладких Au-наночастиц с выпуклыми поверхностями, то $\beta \rightarrow \beta_1(R)$, причём $d\beta_1/dR < 0$. Ещё более интересен случай неплоских, шероховатых (фрактальных) поверхностей наночастиц: $\beta_1 \rightarrow \beta_2(R, D)$, где D – фрактальная размерность, причём $d\beta_2/dD > 0$. Таким образом:

$$\Delta Q < \Delta Q_1 < \Delta Q_2, \quad (2)$$

т. е. переход к фрактальным наночастицам-катализаторам – путь к усилению катализа, что следует ожидать для частиц с электронной щелью. Это характерно для nano-core частиц Ag с диэлектрическим покрытием, а также для Au-наночастиц, для которых при $R < 6$ нм появляется электронная щель. Видимо, эти примеры – не единичны. Необходимо отметить, что нанокатализ обнаруживается и для d-металлов, которые при уменьшении размеров наночастиц не изменяют своей металлической природы, т. е. у них в электронном спектре щель не образуется. Именно такому случаю соответствует наночастица чистого серебра, но свойства катализатора при этом оказываются слабее, чем в случае core-shell [1].

1. A.Z.Moshfegh. J.Phys.D.Appl.Phys. 42, 233001 (2009).

2. B.L.Oksengendler, B.Askarov, I.N.Nurgaliyev, S.E.Maksimov, V.N.Nikiforov. Nanosystems: physics, chemistry, mathematics., 6(2), 249 (2015).

Распространение электромагнитных волн в рассеивающей магнитной среде с учетом линейных по магнитооптическому параметру вкладов

Р. А. Ниязов^{1, 2}, М. А. Кожяев^{3, 4}, В. И. Белотелов^{3, 5}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

³ Российский квантовый центр, Сколково, Россия

⁴ Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия

⁵ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Распространение света в средах с неоднородностями включает в себя широкий круг задач как в масштабе звезд, так и атомов. Интересны поляризационные эффекты в таких средах, а также возможность локализации света. В то же время, намагниченность привносит дополнительные особенности. Так, в рассеивающей магнитной среде может наблюдаться фотонный эффект Холла, усиление эффекта Фарадея и подавление обратного когерентного рассеяния. До сих пор строгое рассмотрение задачи прохождения света через такие среды ограничивалось учетом вкладов, квадратичных по магнитооптическому параметру. Однако, эффект Фарадея – поворот плоскости поляризации света при прохождении через среду – линейно зависит от намагниченности материала.

В данной работе было теоретически исследовано распространение света в магнитной среде со случайным образом расположенными наноразмерными включениями в линейном приближении по магнитооптическому параметру [1]. На основе функций Грина приближения Бурре было получено уравнение Бете-Солпитера в приближении лестничных диаграмм. Были получены собственные вектора и собственные значения для уравнения Бете-Солпитера, соответствующие «поляризационным каналам распространения» света в среде. Точный расчет собственных чисел и собственных векторов был произведен в соответствии с вырожденной теорией возмущений. Изучена зависимость корреляционной матрицы от направления и величины намагниченности среды. Был продемонстрирован новый вид корреляции между ортогональными поляризациями света, который принципиально может существовать лишь в магнитных средах с рассеивающими частицами.

Полученные результаты расширяют представление о поведении света в магнитных рассеивающих материалах. Мы полагаем, что исследуемое явление позволит создать усиленные рассеянием неинвариантные по отношению к обращению времени устройства на основе магнитооптических эффектов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках гранта № 16-02-01065. Работа Р. А. Ниязова выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 16-42-01035).

1. M.A. Kozhaev, R.A. Niyazov, V.I. Belotelov, Phys. Rev. A (2017, to be published).

Влияние электрического поля на зарядовое состояние системы «адатом – поверхность»

А. К. Нухов^{1,2}, Г. М. Мусаев¹, А. М. Агаларов², М. М. Рагимханов¹

¹ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

² Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия

Любое внешнее возмущение может повлиять на состояние поверхности с адсорбированными атомами. Важным вопросом является то, что представляет собой зарядовое состояние на поверхности в процессе адсорбции [1].

Мы провели полную обработку, чтобы рассчитать числа заполнения для системы $Na/Ni(110)$ в зависимости от расстояния, приложенного электрического поля. Отметим, что мы изучали систему $Na/Ni(110)$, поскольку она является одной из наиболее применяемых на практике систем. Она представляет собой состояние между $\phi_o > V_i$ и $\phi_o < V_i$ состояниями, т.е. мы можем получить два типа решений (магнитные $n_a^\sigma \neq n_a^{-\sigma}$ и немагнитные $n_a^\sigma = n_a^{-\sigma}$). Произведённый нами расчет числа заполнения $n_a^{\pm\sigma}$ соответствующих уровней энергии $E_a^{\mp\sigma}$ при $S_o=0.987 \text{ \AA}^o$ для различных значений приложенного электрического поля как функции внешнего поля показывает резко выраженные пики, как на расстоянии $S = 30 \text{ \AA}^o$, так и при $S = 0$. Сравнение плотности состояний адатомов на расстоянии $S = 0$ (рис. 1) и $S = 30 \text{ \AA}^o$ (рис. 2) показывает, что если при $S = 0$ плотность состояний адатомов на поверхности не зависит от того, приложено поле или нет, то в случае $S = 30 \text{ \AA}^o$ плотность состояний адатомов зависит от наличия поля.

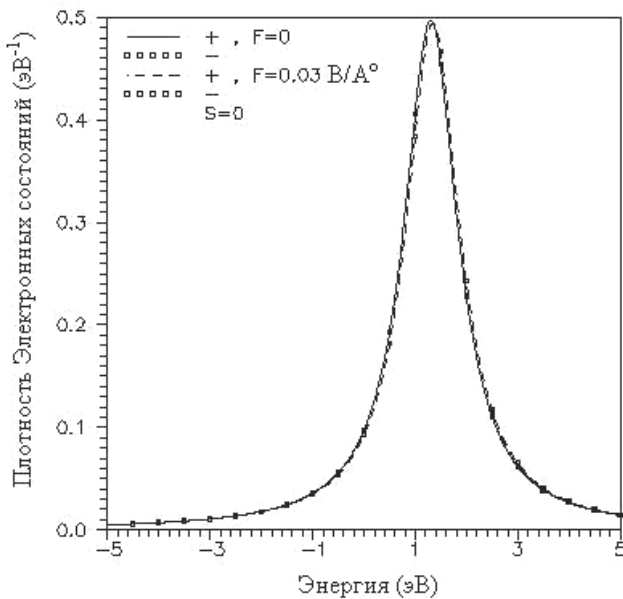


Рис. 1

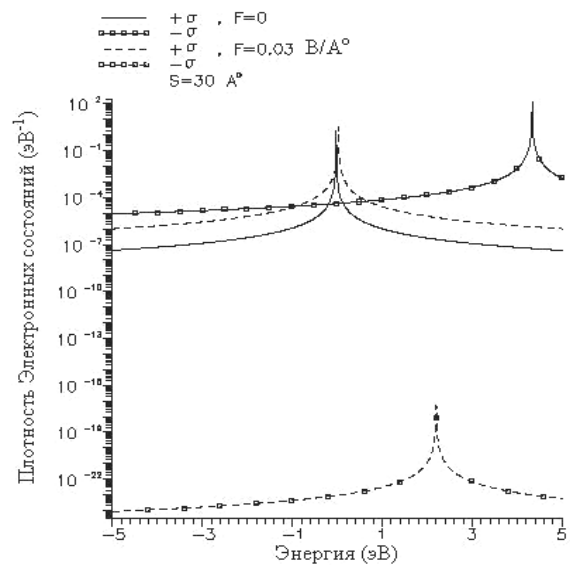


Рис. 2

1. Нухов А.К., Фадель Х.К., Мусаев Г.М. // Вестник Дагестанского государственного университета. 2012. Вып. 6. С. 54-60.

Особенности электронных транспортных свойств полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера на основе Со

Ю. А. Перевозчикова¹, Н. И. Коуров¹, F. Sauerzopf², В. В. Марченков^{1, 3}

¹ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² TU Wien Atominstitut, Vienna, Austria

³ Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

В данной работе исследованы электронные транспортные свойства полуметаллических ферромагнетиков (ПМФ) на основе сплавов Гейслера, т.к. они представляют практический интерес в области спинтроники. Главная особенность ПМФ – присутствие энергетической щели для подсистемы носителей заряда со спином вниз и ее отсутствие для электронов со спином вверх. К таким сплавам относятся Co_2YZ ($Y = \text{Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni}$; $Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$).

Сплавы выплавлены в атмосфере очищенного аргона и отожжены при 800 К 48 часов. Рентгеноструктурный анализ показал, что сплавы имеют однофазное упорядочение в структуре $L2_1$, а отклонения от стехиометрического состава незначительны. Измерение сопротивления и эффекта Холла проводилось общепринятым 4-контактным методом на постоянном токе.

В результате исследований обнаружено, что коэффициент нормального эффекта Холла R_0 для большинства сплавов отрицателен и по абсолютной величине на два-три порядка меньше коэффициента аномального эффекта Холла R_S . Коэффициент R_S имеет положительный знак. Противоположные знаки R_0 и R_S могут быть обусловлены отрицательным значением константы спин-орбитального взаимодействия λ_{eff} . В системе Co_2FeZ константа R_S является функцией электросопротивления с коэффициентом $k=1.56$, что характерно для случая определяющей роли механизма асимметричного рассеяния носителей тока. В системе сплавов Co_2YAl $k=2.9$, что говорит о необходимости учета дополнительного вклада в R_S .

Наличие энергетической щели на E_F в подзоне электронов со спинами вниз приводит к аномалиям на температурной зависимости электросопротивления в виде излома, максимума или минимума вблизи температуры Кюри.

Полученные результаты могут быть полезны при выборе оптимального материала для устройств спинтроники.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Спин», № 01201463330) при частичной поддержке РФФИ (гранты № 15-02-06686 и № 16-32-00072) и программы фундаментальных научных исследований УрО РАН (проект № 15-17-2-12).

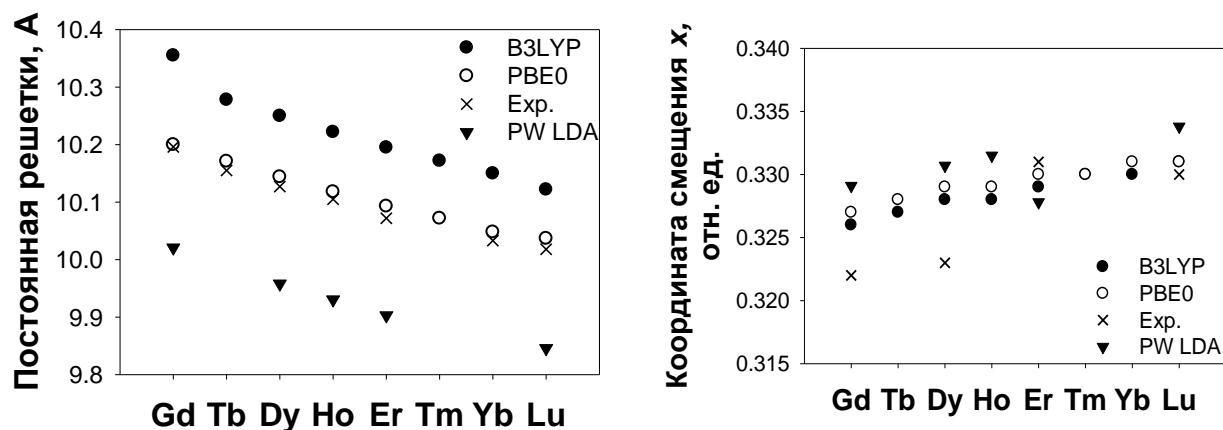
Упругие свойства кристаллов с подрешеткой редкоземельных ионов: *ab initio* расчет

В. П. Петров, В. А. Чернышев, А. Е. Никифоров

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

В данной работе из первых принципов рассчитаны упругие постоянные редкоземельных титановых пироксидов $R_2Ti_2O_7$ ($R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$), пр. гр. $Fd\bar{3}m$. Для расчетов использовалась программа для моделирования периодических структур CRYSTAL14 [1]. Расчеты проводились в базе МО ЛКАО с использованием теории функционала плотности и полноэлектронных базисных наборов для катионов титана Ti^{4+} и анионов кислорода O^{2-} . Редкоземельный катион R^{3+} ($R = Gd-Lu$) описывался псевдопотенциалом, заменяющим внутренние орбитали вплоть до $4f$ и учитывающим квазирелятивистские поправки.

Расчеты упругих постоянных выполнены для кристаллической структуры, соответствующей минимуму сил и напряжений внутри нее, т. е. для предварительно оптимизированной (рис.).



Постоянная решетки $R_2Ti_2O_7$ ($R = Gd - Lu$) рассчитанная методами DFT (B3LYP и PBE0) в сравнении с экспериментальными и расчетными данными других авторов в базе плоских волн (PW-LDA)

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.9534.2017/БЧ) и РФФИ № 16-33-00437 мол_а.

1. R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C.M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, S. Casassa, L. Maschio, M. Ferrabone, M. De La Pierre, P. D'Arco, Y. Noel, M. Causa, M. Rerat, B. Kirtman. Int. J. Quantum Chem. 114, (2014).

Расчет сечения рассеяния нейтронов на спиновых волнах в гелимагнетиках

К. А. Пшеничный, Е. В. Алтынбаев, С. В. Григорьев

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Получена аналитическая зависимость малоуглового сечения рассеяния поляризованных нейтронов на спиновых волнах в геликоидальных магнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория, формирующихся в кубических кристаллах без центра инверсии (пространственная группа R_{213}). Дисперсия спиновых волн в гелимагнетике, 100% поляризованном магнитным полем, имеет вид:

$$E_q = A(\vec{q} - \vec{k}_s)^2 + (H - H_{C2}) = A\vec{Q}^2 + \Delta, \quad (1)$$

здесь A – жёсткость спиновой волны, \vec{k}_s – вектор спирали гелимагнетика. В работе показано, что сечение рассеяния нейтронов на двумерной карте углов рассеяния (θ_x, θ_y) представляет собой 2 круга с определенным радиусом θ_C , с центрами, соответствующими брэгговскому углу дифракции на спирали $\pm\theta_s$, которая ориентирована вдоль приложенного магнитного поля \mathbf{H} . Радиус этих кругов непосредственно связан с жесткостью спиновых волн этого соединения, но зависит от величины приложенного магнитного поля. Показано, что сечение рассеяния зависит от поляризации нейтронов, демонстрируя киральный характер спиновых волн в гелимагнетиках Дзялошинского-Мория даже в полностью поляризованной фазе.

Вектор рассеяния при малоугловом сечении, можно представить в виде:

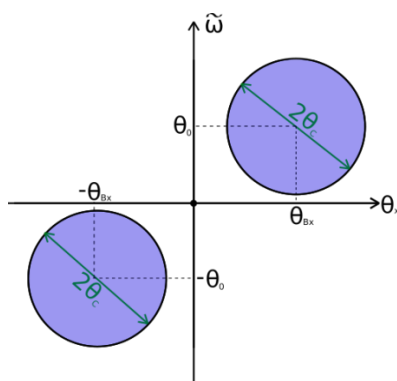
$$\begin{cases} q_x = k_i \theta_x, \\ q_y = k_i \theta_y, \\ q_z = k_i \hbar \omega / (2E), \end{cases} \quad (2)$$

где k_i – волновое число падающего нейтрона, E – энергия падающего нейтрона, $\hbar\omega$ – энергия рассеянного нейтрона. Подставляя компоненты вектора (2) в дисперсионное соотношение (1), делая замену $\theta_0 = \frac{E}{Ak_i^2}$, $\theta_{Bx} = \frac{k_{sx}}{k_i}$, $\theta_C^2 = \theta_0 - \frac{\Delta}{Ak_i^2}$,

$\tilde{\omega} = \frac{\omega}{2E}$ и удовлетворяя условиям сохранения энергии [1] $\omega - E_q = 0$ и $\omega + E_{-q} = 0$, получим два квадратных уравнения:

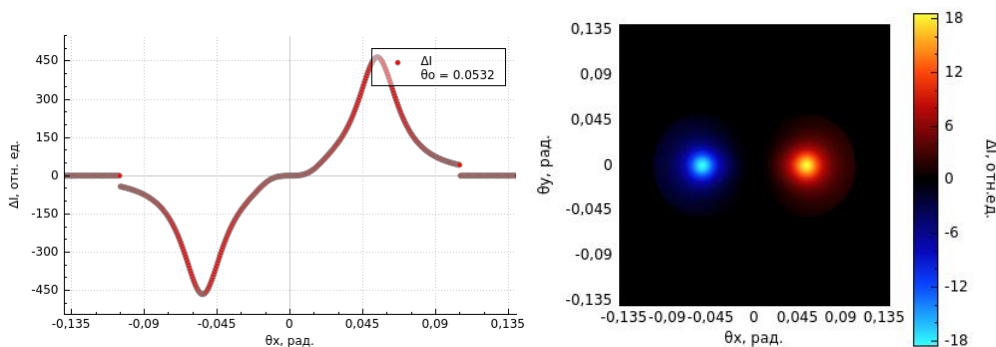
$$\begin{aligned} (\tilde{\omega} - \theta_0)^2 + (\theta_x - \theta_{Bx})^2 &= \theta_C^2, \\ (\tilde{\omega} + \theta_0)^2 + (\theta_x + \theta_{Bx})^2 &= \theta_C^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Эти уравнения удобно представить в виде двух сфер в пространстве углов рассеяния и переданной энергии, показанных на рисунке:



Графическое изображение уравнений (3)

Выражение для сечения рассеяния получается путём учёта геометрического фактора, корней уравнений (3) и взятия интеграла [2] по переданным значениям энергий. На рисунке изображены результаты полученные в ходе построения аналитических зависимостей интенсивности рассеивания нейтронов на спиновых волнах в гелимагнетике от угла рассеяния.



Графическое изображение сечения рассеяния при $\theta_0 = 0.0532 \text{ рад}$ и $\frac{k_{sx}}{k_i} = 0,0974$

Полученные результаты позволяют промоделировать данные малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на спиновых волнах в геликоидальных магнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мория.

1. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, P. Kizhe and S. V. Maleyev. Spin waves in full-polarized state of Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets: Small-angle neutron scattering study. // Physical Review B 92, 220415(R) (2015)
2. С. В. Григорьев, Е. В. Алтынбаев, Н. Eckerlebe, А. И. Окороков. Изучение спиновой динамики в ферромагнетике Fe₆₅Ni₃₅ методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования 2014, No 10, с. 71–78.

Магнитотранспорт в мультиинтерфейсных монокристаллах трехмерных топологических изоляторов на основе Bi_2Se_3

Т. А. Романова^{1, 2}, Д. А. Князев^{1, 2}, Z. Wang², А. В. Садаков¹, В. А. Прудкогляд¹

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

² *The Dresden High Magnetic Field Laboratory, Germany*

В последние несколько лет в физике конденсированного состояния появился новый класс квантовых материалов – трехмерных (3D) топологических изоляторов (ТИ) и топологических сверхпроводников (ТС) [1, 2]. На интерфейсе состояний данных материалов формируется уникальный двумерный (2D) металл, устойчивый к рассеянию на немагнитных примесях и дефектах. Среди известных 3D ТИ большой интерес проявлен к слоистым соединениям на основе Bi_2Se_3 , как к наиболее перспективным для практических приложений в области спинтроники.

В работе представлены результаты серии экспериментов по изучению магнитнотранспортных свойств сильнолегированных образцов Bi_2Se_3 в постоянных (до 20 Тл) и импульсных (до 60 Тл) магнитных полях при сверхнизких температурах (до 0.3 К) [3]. Показано, что в данных мультиинтерфейсных монокристаллах с высокой объемной концентрацией носителей (вплоть до $n_{3D} \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$) происходит формирование множества двумерных (2D) проводящих каналов с концентрацией $n_{2D} \sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$, в которых наблюдаются 2D осцилляции Шубникова-де Гааза (ШдГ). Также проведен анализ фазы осцилляций ШдГ, с высокой экспериментальной точностью была определена фаза Берри близкая к теоретическому значению, которая для топологических изоляторов имеет значение π . На основе результатов исследования сделан вывод о дираковском спектре носителей заряда.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 16-32-00942 мол_а.

1. M. Z. Hasan, C. L. Kane. Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).

2. X.-L. Qi, S.-C. Zhang. Rev. Mod. Phys. 83, 1057 (2011).

3. Веденеев С.И., Князев и др. ЖЭТФ, 147, № 6, 75 (2015).

Моделирование плазмонного резонанса в спектрах оптического поглощения агломератов наночастиц золота в стекле

*А. В. Скиданенко¹, К. А. Яблуновский¹, М. Heinz²,
Л. А. Авакян¹, М. Dubiel², Л. А. Бугаев¹*

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

² Martin-Luther-University Halle-Wittenberg, Halle, Germany

В последнее время возрос интерес к изучению свойств наночастиц золота, серебра и их агломератов на поверхности и в объеме диэлектрических сред. Это связано с наличием у таких объектов плазмонного поверхностного резонанса (surface plasmon resonance – SPR), используемого для разработки устройств фотоники и оптоэлектроники. Структура резонансной линии (SPR), энергетические положения и ширины ее особенностей зависят от атомной структуры, пространственной конфигурации наночастиц и диэлектрических свойств окружающей среды [1]. Часто, исследования свойств SPR ограничиваются рассмотрением зависимости характеристик резонанса от распределения наночастиц по размерам, игнорируя агломерацию наночастиц.

В настоящей работе изучаются оптические спектры экстинкции, имплантированных в силикатное стекло, наночастиц золота, полученных в результате облучения ультрафиолетовым лазерным излучением и последующей очистки поверхности стекла ацетоном.

Для теоретического описания экспериментальных спектров был использован метод Т-матриц рассеяния [2], который позволяет моделировать рассеяние электромагнитной волны агломератами сферических частиц, моделирующих изучаемые наночастицы. Для получения наилучшего согласия теоретического спектра с экспериментальным, значения координат и радиусов сфер наночастиц варьировались при использовании внешнего скрипта Python. Оптимизация была выполнена с использованием метода BFGS, реализованного в библиотеке SciPy. Случаи перекрытия сфер детектировались и не учитывались так, чтобы режим оптимизации мог быть продолжен, не приводя к нефизическим результатам, соответствующим случаям, где подход многосферных Т-матриц не применим.

В результате применения такого подхода установлены значения размеров наночастиц золота и расстояний между ними, усредненные по всем частицам в агломерате. Полученные данные согласуются с наблюдениями методом просвечивающей электронной микроскопии.

1. M. Heinz, V.V. Srabionyan, A.L. Bugaev, V.V. Pryadchenko, E.V. Ishenko, L.A. Avakyan, Y.V. Zubavichus, J. Ihlemann, J. Meinertz, E. Pippel, M. Dubiel, L.A. Bugaev, *Journal of Alloys and Compounds* 681 (2016) 307-315.
2. D. Mackowski and M. Mishchenko, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer A Multiple Sphere T-matrix Fortran Code for Use on Parallel Computer Clusters* 112: 2182-2192 (2011).

Исследование процессов скользящего взаимодействия быстрых электронов с диэлектрическими поверхностями

К. А. Вохмянина, В. С. Сотникова, А. А. Каплий

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Для изучения процессов, происходящих при взаимодействии пучков электронов с диэлектрическими поверхностями, был проведен ряд экспериментов с одиночными диэлектрическими поверхностями из различного материала. В экспериментах использовались следующие материалы: стекло, полиметилметакрилат, оксид алюминия [1–4].

Был обнаружен ряд ориентационных эффектов, не наблюдавшихся ранее в работах с ионами [5]. При отклонении поверхности пластины во всех случаях наблюдалось отклонение положения пучка от первоначального направления, причем данный эффект сильно зависит от схемы заземления торцов [3]. Также положение следа пучка на экране практически не зависит от величины падающего тока в диапазоне 40–170 нА [1, 4]. Для пластин из стекла и полиметилметакрилата явной зависимости положения следа пучка электронов на экране от длины пластины не прослеживалось [3].

Исследование спектра пучков электронов после взаимодействия со стеклянными пластинами показали сохранение энергетического состояния электронов, что позволяет утверждать об отсутствии непосредственного контакта электронов пучка с поверхностью пластины.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект мол_а № 16-32-00258.

1. К.А. Вохмянина, П.Н. Жукова и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 3 (2013).
2. К.А. Vokhmyanina, P.N. Zhukova et al., J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 7, 2(2013).
3. К.А. Вохмянина, П.Н. Жукова и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 4 (2014).
4. К.А. Вохмянина, П.Н. Жукова и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 3 (2015).
5. G. P. Pokhil, K. A. Vokhmyanina, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 72 (2008).

Взаимодействие скирмионов в двумерных спиральных магнетиках

В. Е. Тимофеев, Д. Н. Аристов

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Известно, что в непрерывной $O(3)$ сигма-модели существуют метастабильные солитонные решения (скирмионы Белавина-Полякова) [1]. Интересной особенностью этой модели является то, что энергия многосолитонного состояния не зависит от расстояния между солитонами, что можно интерпретировать как отсутствие взаимодействия между ними. Наиболее просто это можно увидеть, применив метод стереографической проекции и переписав лагранжиан модели в терминах функции комплексного переменного.

Мы рассматриваем нелинейную $O(3)$ сигма-модель, соответствующую двумерному ферромагнетику во внешнем магнитном поле с взаимодействием Дзялошинского-Мории и при нулевой температуре. Вариационные уравнения выписываются в явном виде, но в силу сильной нелинейности, они не имеют столь элегантных решений, как в случае обычной сигма-модели. Мы рассматриваем решения определённого вида, являющие собой модифицированные решения Белавина-Полякова. Магнитное поле и взаимодействие Дзялошинского-Мории определяют размер и фазу скирмионов.

Мы находим, что энергия двухсолитонного решения рассматриваемой системы зависит от расстояния между скирмионами. Парное взаимодействие между скирмионами может приводить к формированию скирмионного кристалла.

1. Белавин А. А., Поляков А. М. Метастабильные состояния двумерного изотропного ферромагнетика // Письма в ЖЭТФ. – 1975. – Т. 22. – №. 10. – С. 503-506.

Теория последовательных фазовых переходов в мультиферроике MnI_2

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

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

Мультиферроики вызывают значительный интерес в связи со своими уникальными свойствами – они обладают одновременно магнитным порядком и электрической поляризацией. Недавно было показано, что спиральные магнетики часто являются сегнетоэлектриками [1], что делает важным изучение свойств этих материалов. Спиральный магнитный порядок может возникнуть вследствие взаимодействия Дзялошинского-Мория или фрустрации в гайзенберговских магнетиках. Последний случай включает в себя спиральные магнетики с треугольными решетками, одному из которых – MnI_2 – посвящено наше исследование. Это соединение находится в спиральной фазе с ненулевой электрической поляризацией при температуре ниже 3.5 К [2].

Согласно экспериментальным данным, в MnI_2 есть три последовательных фазовых перехода при $T_{N1}=3.95$ К, $T_{N2}=3.8$ К и $T_{N3}=3.45$ К [3]. Первые два – переходы второго рода, последний – первого. Между T_{N1} и T_{N2} спины упорядочены в синусоидально-модулированную коллинеарную несоразмерную текстуру, а ниже T_{N3} – в спиральную.

Мы предлагаем теорию, описывающую эти три последовательных перехода. Наша модель включает обменные взаимодействия в плоскости и между плоскостями, дипольное взаимодействие, два типа одноионных анизотропий и взаимодействие Дзялошинского-Мория. Определив параметры модели из сравнения с экспериментом [3], нами были успешно описаны фазовые переходы, воспроизведена траектория вектора модуляции синусоидальной фазы при изменении температуры и спиновые поляризации различных фаз. Достигнуто отличное соответствие с экспериментальными данными.

1. M. Mostovoy, Phys. Rev. Lett. 96, 067601 (2006).

2. T. Kurumaji, S. Seki, S. Ishiwata, H. Murakawa, Y. Tokunaga, Y. Kaneko, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. 106, 167206 (2011).

3. T. Sato et al., Physica (Amsterdam) 213B–214B, 224 (1995).

Квантовые эффекты на скирмионном кристалле

А. В. Цыпильников, Д. Н. Аристов

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Скирмионы — это магнитные солитоны обладающие цилиндрической симметрией, которые представляют большой интерес с точки зрения различных технических приложений, на их основе, например, предполагается создание долговременных носителей информации [4].

Одно из первых предсказаний существования скирмионов в магнетиках было сделано в работе [1], там же была проанализирована стабильность конфигурации скирмиона на диске в классическом случае. Большинство теоретических работ на эту тему ограничивались лишь классическим рассмотрением динамики скирмионов. И относительно недавно в работах [2, 3] был применен метод квазиклассического квантования и проведен анализ спектра магнонов в такой конфигурации и анализ их стабильности. Однако там анализируется конфигурация с одним скирмионом на плоскости с учетом только обменного взаимодействия.

В данной работе рассчитывается спектр магнонов на решетке скирмионов и их волновые функции. Используя эти волновые функции удастся посчитать т. н. квантовое сокращение спина.

Для этого применяется метод ВКБ для одного скирмиона на диске с оптимальным радиусом, минимизирующим классическую энергию системы, с учетом изотропного гейзенберговского обмена, взаимодействия Дзялошинского-Мория и внешнего магнитного поля. Уравнение Шредингера для магнонов в конфигурации с одним скирмионом удастся вывести аналитически, однако спектр и волновые функции магнонов удастся получить только численными методами. Затем, используя метод, аналогичный методу сильной связи для электронных спектров в металле, мы находим спектр магнонов на гексагональной решетке скирмионов и их волновые функции.

1. A. Bogdanov and A. Hubert, JMMM, V 138, (1994).
2. D. N. Aristov, S. S. Kravchenko, A. O. Sorokin, “Magnon spectrum in ferromagnets with a skyrmion”, Письма в ЖЭТФ, 102, 511 (2015).
3. D.N. Aristov and P.G. Matveeva, Phys. Rev. B 94, 214425 (2016).
4. N. Nagaosa and Y. Tokura, Nature Nanotechnology, 8, 899 (2013).

Баллистическая теплопроводность одностенных и двустенных углеродных нанотрубок

Д. В. Чалин, М. В. Авраменко, С. Б. Рошаль

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В низкотемпературной области (при температурах $T < 100$ К) основной вклад в теплопроводность углеродных нанотрубок (УНТ) дают фононы. При этом индивидуальные бездефектные УНТ являются практически идеальными проводниками тепла, в которых работает т. н. баллистический механизм теплопроводности. Данный механизм предполагает большую (по сравнению с длиной УНТ) длину свободного пробега фононов, рассеяние которых фактически осуществляется лишь на концах УНТ.

Использование баллистического приближения существенно упрощает исследование теплопроводности низкоразмерных систем, где главным образом и возможен данный механизм переноса. Оказывается, что теплопроводность одномерного кристалла определяется исключительно частотами в центре и на границе его первой зоны Бриллюэна (ПЗБ). При этом при $T \rightarrow 0$ вклад в теплопроводность дают лишь те дисперсионные ветки, частота которых обращается в ноль в центре ПЗБ.

Основной вклад в низкотемпературную теплопроводность УНТ дают многочисленные низкочастотные моды, для расчета частот которых возможно и целесообразно использование континуальной теории. В выбранной нами модели индивидуальная одностенная УНТ (ОУНТ) представляется как тонкая упругая цилиндрическая мембрана, для описания динамики которой достаточно всего трех упругих коэффициентов. Использование всего одного дополнительного коэффициента для двустенной УНТ (ДУНТ) позволяет учесть межслоевое ван-дер-ваальсово взаимодействие.

Найдены простые аналитические выражения, описывающие нелинейную часть (исчезающую при $T \rightarrow 0$) зависимости теплопроводности ОУНТ и ДУНТ от температуры. Показано, что теплопроводность любой ДУНТ до температур порядка 10-15К (в зависимости от ее радиуса) оказывается меньше теплопроводности внешней трубки, но больше внутренней. С ростом температуры теплопроводность ДУНТ оказывается больше теплопроводности любой из составляющих ее свободных нанотрубок, но меньше их суммарной теплопроводности.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 15-12-10004).

К динамической теории дифракции тепловых нейтронов на деформированных кристаллах

Т. Чен

Московский технологический университет, Москва, Россия

Развита динамическая теория Лауэ- и Брэгг-дифракции тепловых нейтронов на деформированных кристаллах произвольной толщины. Рассматривались различные виды деформации (упругий механический изгиб, ультразвуковая волна, температурный градиент). На основе развитой теории рассмотрены следующие динамические эффекты: 1) пространственное сжатие (фокусировка) пучка нейтронов при Лауэ-дифракции как внутри кристалла, так и вне его, при Брэгг-дифракции – фокусировка нейтронов в вакууме; 2) монохроматизация нейтронов при динамической дифракции деформированными кристаллами; 3) управление нейтронным пучком. Представлена динамическая теория фокусирующего нейтронного спектрометра в схемах Кошуа, Дю-Монда, Иоганна.

Структура и динамика решетки редкоземельного бората $\text{GdCr}_3(\text{VO}_3)_4$: *ab initio* расчет

В. А. Чернышев, А. Е. Никифоров, В. П. Петров, А. В. Сердцев

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

Редкоземельные бораты привлекают внимание исследователей как оптические материалы, в связи с чем представляет интерес детальное исследование их фононного спектра. В работе в рамках теории функционала плотности проведен *ab initio* расчет кристаллической структуры и фононного спектра кристалла $\text{GdCr}_3(\text{VO}_3)_4$ в фазе $R32$, а также в фазе $C2/c$. Расчеты проведены в рамках МО ЛКАО подхода, с использованием гибридного функционала, учитывающего как локальный, так и нелокальный, в формализме Хартри-Фока, обмен. Для расчетов была использована программа CRYSTAL, предназначенная для *ab initio* моделирования периодических структур [1]. В результате расчетов определены координаты ионов в элементарной ячейке, постоянные решетки, частоты и типы фундаментальных колебаний, а также интенсивности линий в спектрах инфракрасного отражения для обеих фаз.

Результаты расчета находятся в разумном согласии с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.9534.2017/БЧ), и Российского научного фонда (проект № 16-33-00437_мол_а).

1. CRYSTAL14. R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C.M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, S. Casassa, L. Maschio, M. Ferrabone, M. De La Pierre, P.D'Arco, Y. Noel, M. Causa, M. Rerat, B. Kirtman. Int. J. Quantum Chem. V. 114., P. 1287 (2014).

Антиферромагнитные спиновые скосы как причина возникновения сегнетоэлектричества в хиральном мультиферроике Cu_2OSeO_3

В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Кубический хиральный кристалл Cu_2OSeO_3 представляет собой мультиферроик 2-го типа, в котором возникновение закрученной спиновой структуры ниже точки Кюри сопровождается появлением электрической поляризации, причём сегнетоэлектрические свойства кристалла тесно связаны с магнитными [1]. В настоящее время эту связь принято описывать в рамках «односпиновой» модели, в которой связанный с каждым отдельным спином электрический диполь полностью задаётся ориентацией этого спина относительно кристаллографических осей. В макроскопическом описании это эквивалентно тому, что в любой точке кристалла электрическая поляризация \mathbf{P} жёстко связана с намагниченностью \mathbf{M} [2].

Мы предлагаем альтернативную модель [3], в которой электрическая поляризация в Cu_2OSeO_3 возникает благодаря неколлинеарности соседних спинов, связанной с антиферромагнитными скосами [4]. Эти скосы суть следствие взаимодействия Дзялошинского–Мории и во многом похожи на ферромагнитные скосы в слабых ферромагнетиках. Выведено выражение для локальной электрической поляризации, включающее члены зависящие от пространственных производных намагниченности $\partial_\alpha M_\beta$. В рамках микроскопической теории показано, что скалярное и векторное произведения спинов, $(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)$ и $[\mathbf{s}_1 \times \mathbf{s}_2]$, вносят вклады одного порядка в выражение для электрической поляризации.

1. J.-W. G. Bos, C. V. Colin, T. T. M. Palstra, Phys. Rev. B 78, 094416 (2008).
2. M. Mochizuki, S. Seki, J. Phys.: Condens. Matter 27, 503001 (2015).
3. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko, arXiv:1608.03152.
4. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko, J. Magn. Magn. Mater. 382, 142 (2015).

Новое состояние вещества, плоские зоны и топологические квантовые фазовые переходы

В. Р. Шагинян

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Открыто новое состояние вещества. Это новое состояние вещества представлено различными металлами с тяжелыми фермионами, двумерными фермижидкостями жидкостями типа 3He на графитовой подложке, квантовыми спиновыми жидкостями, квазикристаллами и изоляторами с одномерной квантовой спиновой жидкостью.

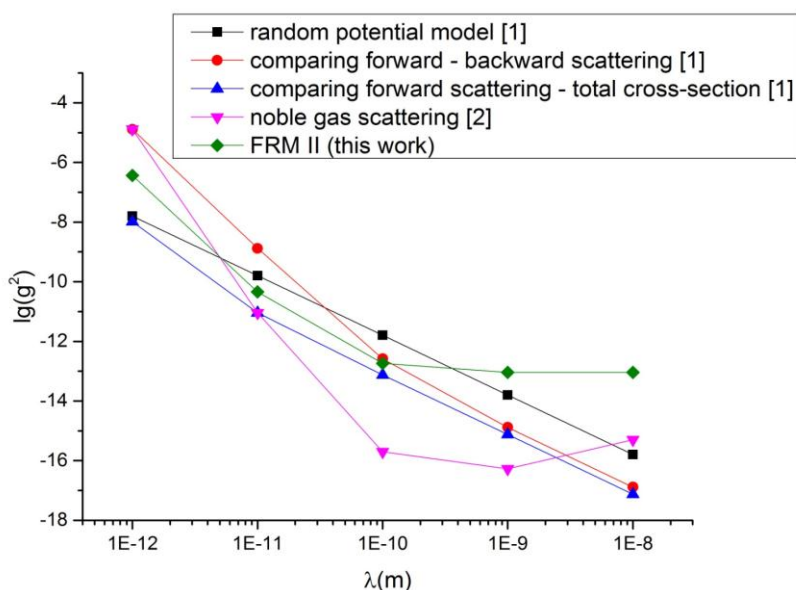
В лекции на основе анализа широкого круга экспериментальных данных показано, что все эти вещества при низких температурах ведут себя однообразно: их термодинамические, транспортные и релаксационные свойства обнаруживают универсальное скейлинговое поведение. Такое универсальное поведение формируется топологическим квантовым фазовым переходом, создающим плоские зоны, и хорошо объясняется в рамках теории фермионной конденсации.

Поиск новых сил во взаимодействии элементарных частиц методом нейтронного рассеяния

Д. Д. Шапиро, В. В. Воронин

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В настоящее время поиск выхода за рамки Стандартной модели (СМ) элементарных частиц является одним из приоритетных направлений современной физики. Одним из таких выходов за СМ является существование нового типа фундаментальных взаимодействия переносимых новыми векторными или скалярными бозонами [1, 2]. Для этой цели возможно использо-



вание метода нейтронного рассеяния [3, 4]. В данной работе обсуждается возможность измерения зависимости амплитуды рассеяния нейтрона на ядре от переданного импульса (или от угла рассеяния) с помощью метода порошковой дифракции и получения ограничений на константу связи для нового дальнегодействующего (в сравнении с ядерным) взаимодействия.

В рамках данной работы был проведен расчет, показывающий состоятельность этой идеи. Кроме того, исходя из экспериментальных данных, полученных на реакторе FRM II, были вычислены ограничения на константу связи скалярного взаимодействия. Показано, что новая оценка не уступает уже имеющимся, что является хорошей мотивацией к проведению полноценного эксперимента.

Авторы выражают благодарность Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, в частности Сенишину А., за предоставленные данные.

1. J.E. Moody and Frank Wilczek, Phys.Rev. D 30 (1984).
2. W.-M. Yao *et al.*, J. Phys. G **33**, 1 (2006).
3. V.V. Nesvizhevsky, G. Pignol, K.V. Protasov, Phys.Rev. D **77**, 034020 (2008).
4. Y. Kamiya, K. Itagaki, M. Tani, G. N. Kim, and S. Komamiya, Phys. Rev. Lett. 114, 161101 (2015).

Природа осцилляций интенсивности зеркального рефлекса от поверхности растущей монокристаллической пленки

С. М. Шкорняков

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Предложена модель, описывающая процесс зеркального отражения электронного пучка от поверхности растущей эпитаксиальной монокристаллической пленки. Для этой модели получены аналитические выражения и проведена графическая иллюстрация формул в зависимости от значений различных параметров, характеризующих специфику эксперимента. Предложены различные схемы экспериментов, которые могут подтвердить выводы теории.

Инструментальная линия двухкристального спектрометра при преимущественно резонансном поглощении нейтронов

Й. Шмайсер¹, Д. В. Львов^{1, 2}, Н. О. Елютин¹, А. Н. Тюлюсов^{1, 2}

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

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

Хорошо известное соотношение [1] для инструментальной линии двухкристального спектрометра получено в предположении о слабой зависимости сечения поглощения нейтронов от длины волны в диапазоне, определяемом степенью монохроматичности.

Такое утверждение можно сделать в случае преимущественно потенциального характера сечения рассеяния и поглощения. Однако при изучении дифракции нейтронов с длиной волны, лежащей вблизи резонанса поглощения ядер, составляющих исследуемый кристалл, такое утверждение уже будет неверно. Например, для ¹¹⁵In отношение сечения для длин волн 1.6 и 1.7 Å составляет 1.03, для 0.3 и 0.4 Å уже 2.88 [2]. Такая задача возникает при исследовании эффекта аномального пропускания нейтронов при энергии нейтрона вблизи резонансных уровней ядер материала кристалла [3].

Построены выражения для инструментальной линии двухкристального спектрометра, не требующие ограничения на характер зависимости сечения поглощения от длины волны. Получены модельные инструментальные линии для спектрометрических схем Брэгг-Брэгг, Брэгг-Лауэ, Лауэ-Брэгг, Лауэ-Лауэ на примере слабопоглощающего кристалла Ge в области слабой зависимости сечения от длины волны и для InSb в области длин волн, обеспечивающих преимущественно резонансный характер поглощения.

1. Ю. Г. Абов, Н. О. Елютин, А. Н. Тюлюсов, ЯФ 65, 1933 (2002).

2. <http://atom.kaeri.re.kr/nuchart/>

3. Н. О. Елютин, Д.В. Львов, А. Н. Тюлюсов, в *Сборнике тезисов L Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния ФКС-2016*, с. 48, (Гатчина, 2014).

Частотно-временной вейвлет-анализ в рефлектометрии для определения слоевого упорядочения в тонких пленках

С. Б. Астафьев, Л. Г. Янусова

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

В отличие от оконного преобразования Фурье, вейвлет-преобразование [1] одномерных сигналов обеспечивает переменное разрешение сразу в двух пространствах, что позволяет выявлять локальные особенности этих сигналов. Показано, что при двумерном преобразовании экспериментальной кривой интенсивности зеркального отражения в зависимости от угла падения и пространственной частоты (координаты) возможно определение не только толщины, но и порядка следования отдельных слоёв с характерным поведением электронной плотности, что в ряде случаев позволяет восстановить электронный профиль плёнки в целом. В программном комплексе BARD [2] авторами был реализован весь спектр вейвлет-преобразований, разработанный в настоящее время, благодаря чему при исследовании слоистых структур методами рефлектометрии возможно использовать вейвлеты разнообразной формы в зависимости от характера выявляемой особенности исследуемого сигнала.

В работе на примере модели четырёхслойной плёнки толщиной 310 Å (толщины слоёв 50, 70, 90 и 100 Å) показано применение частотно-временного вейвлет-преобразования. Если среди десяти экстремумов автокорреляционной функции ($M=N(N+1)/2$, $N=4$) выявить толщины четырёх слоев модельной плёнки представляется проблематичным, не говоря уже о их расположении, то использование вейвлет-преобразования даёт чёткую картину толщин и порядка следования слоёв. Пик, соответствующий слою толщиной $Z=90$ Å проявляется при меньших величинах q_z , следовательно, этот слой располагается первым на пути распространения рентгеновского луча. Аналогичным образом определяется последовательность слоёв считая от границы воздух-плёнка: {90, 70, 50, 100}. Таким образом, профиль модели четырёхслойной плёнки оказывается полностью восстановлен.

1. Астафьева Н.М., УФН, 1145, 166, (1996).

2. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г., Прикладная математика и информатика, МАКС Пресс М., 66, 44, (2013).

Нагревательная ячейка образца для монокристалльного дифрактометра “SuperNova”

Н. Е. Антонов¹, Р. Г. Бурковский¹, С. Б. Вахрушев^{1, 2}, А. В. Маслевцов¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Система SuperNova является мощнейшим инструментом, для прецизионного исследования монокристаллов, двумя различными микрофокусными источниками рентгеновского излучения. Большой интерес представляет исследование поведения монокристаллов при различных температурах. Существующие температурные приставки Cobra и Helijet представляют собой разновидности бловера и позволяют варьировать температуру образца в пределах 15–75 К и 80–500 К соответственно. Для достижения больших температур была спроектирована, создана и в настоящее время тестируется специализированная нагревательная ячейка. Ячейка представляет собой керамический нагревательный элемент (горячий палец), в который будет монтироваться латунная игла с образцом. Нагревательный элемент расположен на подложке, с которой производится отвод тепла. Для предотвращения термического повреждения частей дифрактометра, после установки на гониометрическую головку, конструкция будет обдуваться потоком воздуха. Так же при температурах более 750 К будет использоваться вакуумный колпак. Управление ячейкой осуществляется посредством термостата, разработанного специально под эту задачу. Максимально достижимая температура образца составит ~ 850 К.

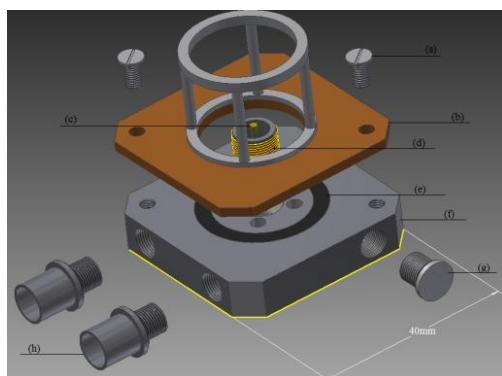


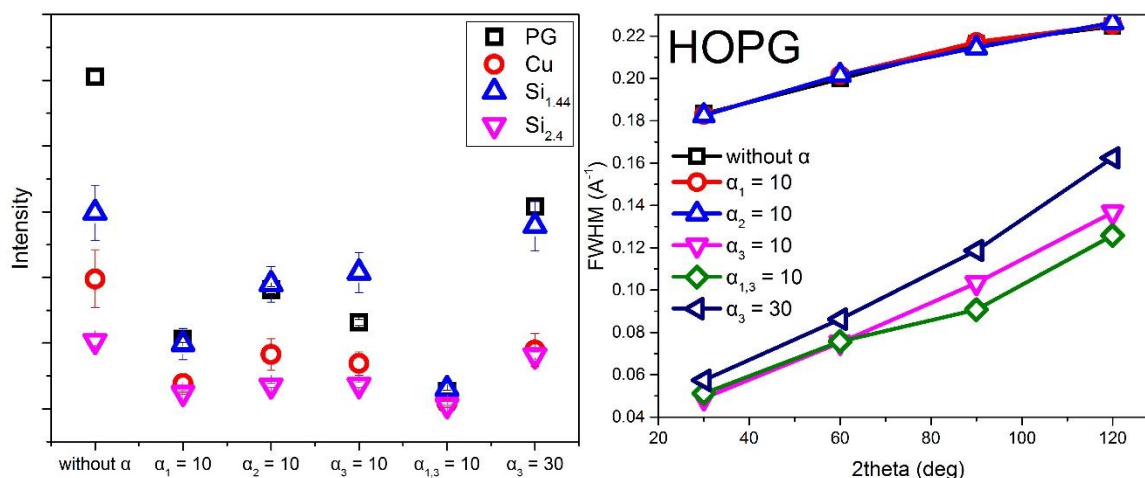
Схема конструкции: (a) – стальные болты, (b) – каркас вакуумной камеры, (c) – образец, (d) – система нагрева, (e) – резиновая прокладка, (f) – система охлаждения, (g) – запирающий итекер, (h) – итекеры

Расчет горизонтального 4-кругного дифрактометра DC-1 на канале ГЭК-9 реактора ПИК

А. А. Быков, Ю. П. Черненко

*Петербургский институт ядерной физики им Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Рассмотрена схема 4-кругного дифрактометра с изменяемой длиной волны для исследования магнитной и кристаллической структуры. Параметры схемы оптимизированы для канала ГЭК-9 реактора ПИК. Приведены расчетные параметры установки.



Значения нормированной интегральной интенсивности (при значении $2\theta_{\text{детектора}} = 94^\circ$) и ширины на полувысоте для различных наборов коллимаций для монохроматора HOPG

Монохроматоры

Take off angle	PG (002)	Cu (220)	Si (113)
42°	$\lambda = 2.4 \text{ \AA}$, PG filter $\lambda/2$	$\lambda = 0.91 \text{ \AA}$, without filter	$\lambda = 2.4 \text{ \AA}$, PG filter $\lambda/3$
94°	$\lambda = 4.9 \text{ \AA}$, Be filter $\lambda/2$	$\lambda = 1.87 \text{ \AA}$, Sm filter $\lambda/2$	$\lambda = 1.17 \text{ \AA}$, Er filter $\lambda/3$

Коллимация:

1. $\alpha_1 = 38^\circ$ $\alpha_2 = \infty$ $\alpha_3 = 33^\circ$ (естественная коллимация);
2. $\alpha_1 = 38^\circ$ $\alpha_2 = \infty$ $\alpha_3 = 10^\circ$;
3. $\alpha_1 = 10^\circ$ $\alpha_2 = \infty$ $\alpha_3 = 10^\circ$.

1. Caglioti G. // Acta Crystallogr., 1964. Vol. 17, № 10. P. 1202–1213.
2. Cooper M.J. et al. // Acta Crystallogr. Sect. A., 1968. Vol. 24, № 5. P. 481–484.
3. Lefmann K. and Nielsen K. // Neutron News. 1999. Vol. 10, № 3. P. 20–23.

Структурные превращения в нанокластерах золота и никеля: метод молекулярной динамики

С. А. Васильев, В. М. Самсонов, И. В. Талызин, А. Г. Бембель

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

С использованием молекулярной динамики и потенциала сильной связи проведено моделирование процессов плавления и кристаллизации в нанокластерах переходных металлов, в частности золота и никеля. Полученные температуры плавления и кристаллизации демонстрируют линейную зависимость относительно обратного радиуса частицы. Аналогично себя ведут и теплоты указанных фазовых переходов. С использованием метода многогранников Вороного-Делоне проанализировано изменение локальной структуры нанокластеров при их плавлении и кристаллизации. Сделан вывод о том, что как плавлению, так и кристаллизации отвечает плавный кроссовер, т. е. фазовые переходы происходят постепенно, а не скачком. Также обсуждается вопрос о применимости понятий фазового перехода и термодинамической фазы к наночастицам различного размера.

Времяразрешенная фотоэмиссионная спектроскопия в применении к топологическим изоляторам

В. Ю. Ворошин¹, А. М. Шикин¹, А. Г. Рыбкин², Y. Ishida³

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

² Ресурсный центр «Физические методы исследования поверхности» СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

³ Институт физики твердого тела Токийского университета, Кашива, Япония

В данных тезисах речь пойдет об исследовании заполненных и незаполненных состояний валентной зоны топологических изоляторов на примере допированного ванадием BiTeSe , при использовании метода времяразрешенной фотоэмиссионной спектроскопии.

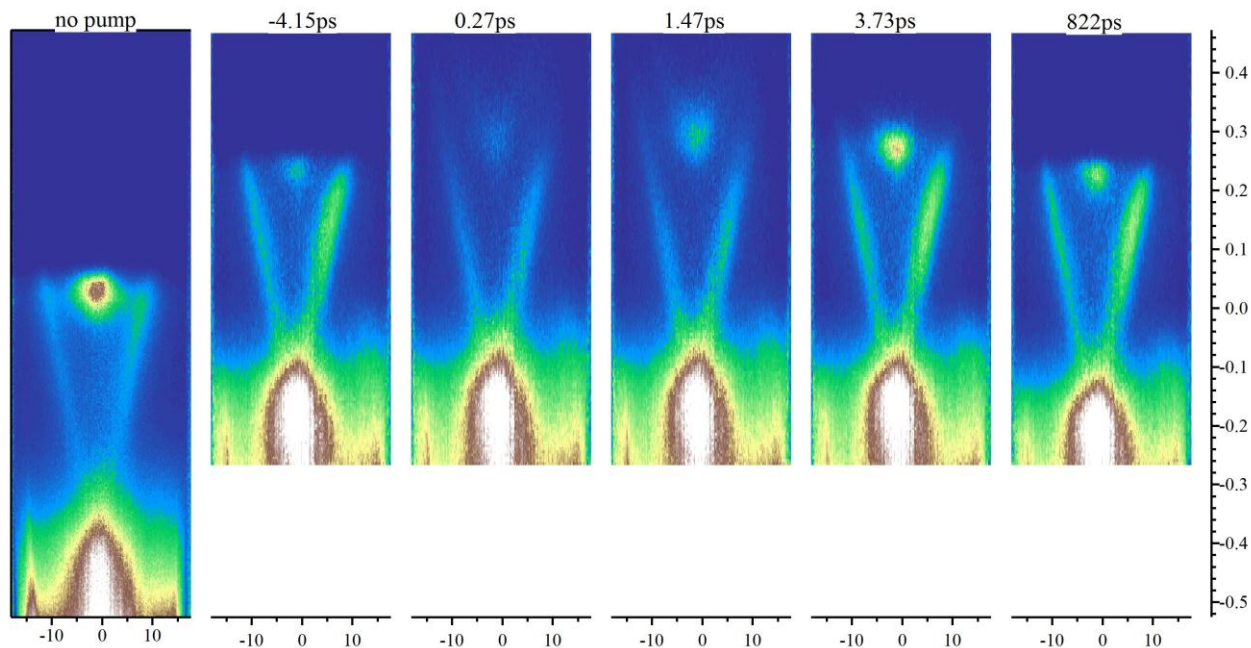
Рассмотрим механизм фотоэлектронной спектроскопии. Сосредоточимся на одном фотоне: при попадании на образец он проходит некоторое расстояние вглубь где и «поглощается» электроном. Теперь этот электрон, обладая дополнительной энергией фотона, может преодолеть потенциальный барьер твердого тела, вылететь в вакуум и быть зарегистрированным. Изначальная энергия зарегистрированного электрона может быть определена используя формулу Эйнштейна, зная энергию изначального фотона. Важно отметить, что глубина из которой такие электроны могут покинуть твердое тело ограничена длиной свободного пробега.

Теперь рассмотрим фотоэлектронную спектроскопию с угловым разрешением. Принцип работы сохраняется, но учитывается угол вылета электронов из твердого тела. Принимая во внимание то, что квазиимпульс электрона много больше импульса фотона, можно читать, что при процессе фотовозбуждения он не изменяется. Т. о. угол вылета электронов из твердого тела можно пересчитать в значение параллельной поверхности составляющей их изначального квазиимпульса.

Как же исследовать незаполненные состояния системы? Прежде всего эти состояния необходимо «заселить». Для это используется памп импульс (импульс накачки), энергии фотонов этого импульса недостаточно для того, чтобы электроны покинули твердое тело, но достаточно, чтобы перевести из на незаполненные состояния. С небольшой задержкой после памп импульса идет проб импульс, которого уже достаточно фотоэмиссии электронов. Т. о. фотоны проб импульса также могут быть поглощены возбужденными электронами, находящимися на ранее незаселенных состояниях. Величину задержки между памп и проб импульсами можно менять, таким образом исследуя релаксацию системы.

В данной работе будут представлены данные по времяразрешенному памп-проб фотоэмиссионному эксперименту над системой допированного ванадием топологического изолятора BiTeSe . Был исследована динамика процессов релаксации, а также выяснено, что система характеризуется огромным фотогальваническим эффектом [1]. Эксперимент был проведен с исполь-

зованием оборудования [2] Института физики твердого тела Токийского университета.



Представлена зависимость энергии связи электронов свободных и занятых состояний системы допированного ванадием BiTeSe от угла их вылета (пропорционально параллельной составляющей импульса). Первый рисунок – прямая фотоэмиссия (без памп импульса), все остальные – фотоэмиссия с памп а затем проб импульсом, приведенные для различной задержки между ними

1. Madhab Neupane et al., PRL 115, 116801 (2015).
2. Y. Ishida et al., Review of scientific instruments 85, 123904 (2014).

Влияние геометрии отдельных секций на характеристики изогнутого нейтроновода

А. У. Гайсин, К. А. Павлов, Е. В. Москвин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время в Петербургском институте ядерной физики им. Б. П. Константинова завершается строительство высокопоточного реактора ПИК, предназначенного для широкого спектра нейтронных исследований на выведенных пучках. В данный момент ведется работа над будущей нейтроноводной системой реактора, осуществлена оптимизация двух нейтроноводов для приборов первой очереди. В связи с этим встает важный вопрос анализа потерь в нейтроноводах. Изогнутый нейтроновод в реальности представляет собой конструкцию из множества последовательных прямых секций. Геометрические разъюстировки секций, неидеальные формы и характерный угол установки секций относительно друг друга влияют на эффективное сечение канала. В докладе представлен анализ потерь в зависимости от неидеальности геометрии секций.

Влияние нестехиометрии на структуру оксидного ядерного топлива

Н. А. Иванова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Перспективным направлением в развитии атомной энергетики является использование смешанного уран-плутониевого оксидного топлива. Его термодинамические характеристики имеют важное значение для прогнозирования поведения в реакторах при высоких выгораниях и особенно кислородный потенциал. Однако для изучения характера изменения термодинамических свойств таблеток смешанного уран-плутониевого оксидного топлива $U_{1-y}Pu_yO_{2\pm x}$ в зависимости от нестехиометрии x , содержания Pu и температуры целесообразно вначале проводить измерения на уран-цериевых оксидах $U_{1-y}Ce_yO_{2\pm x}$. Это объясняется тем, что церий является химическим аналогом плутония и в то же время не относится к радиоактивным и токсичным материалам, что облегчает проведение экспериментов и их безопасность.

Поэтому в соответствии с целью работы и поставленными задачами были изучены концентрационные и температурные зависимости кислородного потенциала UO_2 , содержащего 20 мас. % CeO_2 (близкая концентрация плутония характерна для топлива быстрых реакторов) с использованием неразрушающего потенциометрического метода измерения эдс твердоэлектролитной гальванической ячейки в интервале температур от 850 до 1050 °С.

Для электрохимического изменения содержания кислорода в анализируемом образце и построения концентрационных зависимостей кислородного потенциала нестехиометрического оксида использовался метод твердофазного кулонометрического титрования, который заключался во введении в образец (окислении) или удалении из него (восстановлении) строго дозированного количества кислорода путем пропускания постоянного тока (в разных направлениях при окислении или восстановлении) через твердоэлектролитную гальваническую ячейку при ее фиксированной температуре.

На основании полученных экспериментальных данных проведен анализ влияния церия на термодинамические свойства диоксида урана, которые определяют ряд физических и химических процессов, происходящих в твэлах с оксидным топливом.

Прототип газоразрядного ПЧД нейтронов с конвертером В₄С

Д. С. Ильин¹, В. А. Андреев¹, А. Г. Крившич¹, В. В. Рунов¹, G. Nowak²

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

² *Helmholtz-Zentrum Geesthacht Zentrum für Material- und Küstenforschung GmbH,
Geesthacht, Germany*

Сегодня бурное развитие альтернатив ³He-детекторной технологии связано не только с дефицитом этого изотопа на рынке, но и тем фактом, что новые конструкции с иными конвертерами нейтронов по ряду параметров превосходят характеристики «классических» ³He-детекторов, например, по нагрузочной способности. Кроме этого, работа детекторов в режиме продува рабочей газовой смеси позволяет существенно упростить конструкцию, снизить требования к конструкционным материалам и пр.

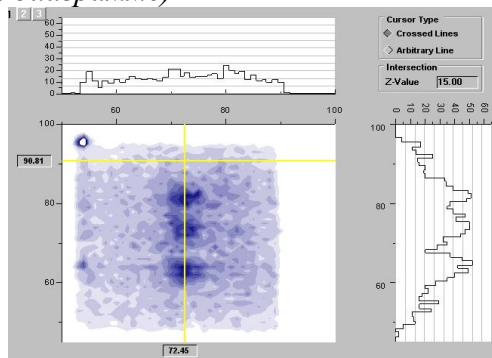
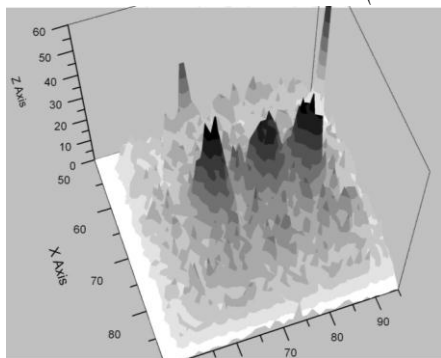
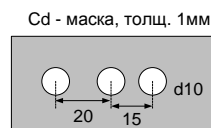
В работе представлены результаты первых испытаний прототипа детектора нейтронов с одним конвертирующим слоем В₄С (обогащение по ¹⁰B ~ 95 %) толщиной 1.2 мкм, нанесенного на алюминиевый лист толщиной 0.5 мм и выполняющего также функцию дрейфового электрода. Под действием нейтронов, из пленки В₄С вылетают продукты реакции, которые регистрируются пропорциональной камерой (анод 15 мкм, шаг анода 2 мм, расстояние «анод-катод» 2.3 мм). Для определения координаты события применяется метод съема сигналов на линию задержки. Размер чувствительной области детектора составляет 100 × 100 мм, эффективная толщина детектора ~18 мм. Детектор работает при продуве рабочего газа.

Определены рабочие режимы детектора (газ – 100 % CF₄, н. у.): HV_{анод}=1.7÷2.0 кВ, HV_{дрейф}=(1÷2) кВ, измерены счетные характеристики детектора, амплитудные спектры и координатные распределения для Pu(Be) источника с использованием кадмиевой маски (рис.).

Распределение нейтронов от источника Pu(Be) при наложении на чувствительную область детектора кадмиевой маски.

Слева: трехмерное отображение интенсивности нейтронов.

Справа: двухкоординатное отображение интенсивности с сечениями по осям (линии на диаграмме)



Моделирование крыла обратной стреловидности, модифицированного методом сквозных проточин

Е. А. Казаков, А. А. Бондарчук

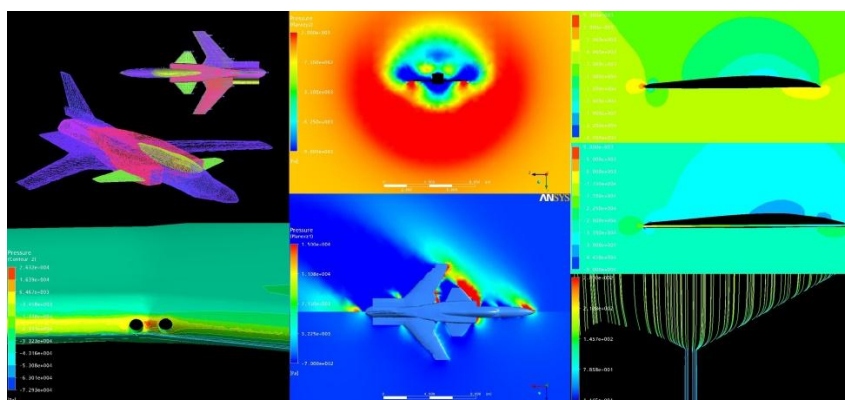
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Крыло обратной стреловидности (КОС) обладает серьёзными преимуществами перед классическим крылом на большинстве режимов: сверхманёвренность на малых скоростях, повышенная надёжность на режимах взлёта и посадки, меньшая эффективная площадь рассеяния, меньшая радиолокационная заметность, большая удельная подъёмная сила. При всех этих неоспоримых достоинствах, КОС обладает существенным недостатком. Опасное явление флаттера, возникающее в момент перехода на сверхзвуковой режим, до сих пор не удалось преодолеть.

Самый простой способ сделать это – изменить конструкцию самолёта так, чтобы исключить столкновение потоков, но это решение, однако, приведёт к непомерно высоким требованиям к жёсткости крыла. Добиться выполнения этих требований можно, используя современные композитные материалы. Выяснение структуры, которой должен обладать искомый материал – одно из направлений моей текущей работы.

Не столь кардинальный способ – вносить в конструкцию минорные изменения, не затрагивающие основной концепт (тем не менее, известны исторические случаи успеха этого метода). Я занимаюсь генерацией и проверкой этих вариативных изменений, моделируя в среде ANSYS полёты созданной мной модели самолёта с КОС на дозвуковом и сверхзвуковом режимах.

Один из методов решения проблемы – микроперфорирование крыла, смещающее его собственную частоту в недостижимые для флаттера зоны спектра. Однако я предлагаю радикальный метод сквозных проточин для разнесения конкурирующих потоков. Являясь, по большому счёту, вариацией первого способа, этот метод также требователен к жёсткости силового набора, но, тем не менее, не столь взыскателен к характеристикам обшивки крыла.



Программный пакет ATSAS для анализа данных малоуглового рассеяния

*П. В. Конарев^{1, 2}, В. В. Волков¹, М. В. Петухов^{1, 3}, Д. Франке⁴, А. Г. Кихней⁴,
А. Панджкович⁴, Х. Мертенс⁴, К. Керр⁴, С. Джеффрис⁴, Д. И. Свергун⁴*

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

³ *Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

⁴ *Европейская молекулярная биологическая лаборатория, Гамбург, Германия*

Программный пакет ATSAS предназначен для обработки и анализа данных малоуглового рассеяния от изотропных систем в растворах [1, 2]. Основным приложением пакета ATSAS является определение формы частиц макромолекул и биологических комплексов, а также анализ функции распределения частиц по размерам в растворах нанокompозитных материалов. Набор программ, входящих в пакет ATSAS, позволяет проводить как первичную обработку данных (манипуляции с кривыми рассеяния, вычитание фонового сигнала, экстраполяция к нулевой концентрации, вычисление интегральных структурных параметров), так и последующее построение трехмерных моделей низкого разрешения, используя *ab initio* методы определения формы и метод молекулярной тектоники.

Проверка и сравнение имеющихся моделей высокого разрешения, а также достраивание неизвестных фрагментов молекул по данным малоуглового рассеяния с помощью программ, входящих в пакет ATSAS, широко применяются при анализе малоугловых данных от биологических образцов. Для полидисперсных объектов предусмотрено моделирование олигомерного состава смесей и оценка подвижности достраиваемых частей макромолекул в разбавленных растворах.

ATSAS пакет находится в свободном доступе для академических пользователей (<http://www.embl-hamburg.de/biosaxs/software.html>), имеет кросс-платформенную поддержку, а также версии программ для запуска в режиме on-line.

1. P.V. Konarev, M.V. Petoukhov et al., J. Appl. Cryst. 39, 277 (2006).

2. M.V. Petoukhov, D. Franke et al., J. Appl. Cryst. 45, 342 (2012).

Восстановление решений при анализе полидисперсной системы в зависимости от зашумленности данных малоуглового рассеяния

А. Е. Крюкова, П. В. Конарев, В. В. Волков

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР) является мощным инструментом при исследовании сложных многокомпонентных полидисперсных объектов в растворах. Для такого рода систем была разработана программа MIXTURE [1], входящая в пакет программ ATSAS [2]. Она позволяет моделировать многокомпонентные системы, содержащие различные типы полидисперсных частиц и учитывать межчастичное взаимодействие.

Для нахождения диапазона устойчивых решений двухкомпонентных полидисперсных систем, состоящих из двух сферических частиц, по данным малоуглового рассеяния нами было проведено моделирование на теоретических наборах данных для шести модельных систем (исследовались данные без шума и с относительным уровнем шума 25 %, отвечающим распределениям Гаусса и Пуассона).

Параметры, описывающие систему (радиусы сфер, их полидисперсности и объемные доли), поочередно изменялись в широком диапазоне при фиксированных значениях остальных параметров, и при этом исследовалась возможность восстановления правильного решения программой MIXTURE. По результатам моделирования были получены оценки диапазона для параметров, при которых восстановление возможно. Также проводилось исследование сходимости при одновременном варьировании радиусов обеих сферических частиц. Показано, что диапазон области стартовых значений параметров, с которых возможно восстановление правильного решения в большинстве случаев становится шире при наличии пуассоновского шума и сужается при добавлении гауссовского шума.

Таким образом, диапазон сходимости к правильному решению может зависеть как от типа варьируемых параметров, так и от вида и уровня добавляемого шума. Данная информация может быть использована для оценки более эффективного стартового приближения модели и нахождения правильного решения.

1. P. V. Konarev et al., J. Appl. Cryst. 36, 1277 (2003).

2. M. V. Petoukhov et al., J. Appl. Cryst. 45, 342 (2012).

Модифицированное кинематическое приближение для моделирования полного рефлектометрического эксперимента

А. В. Белушкин, С. А. Маношин

Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ, Дубна, Россия

В работе проведено моделирование модифицированным кинематическим приближением полного рефлектометрического эксперимента (зеркального отражения и картины дифракции) нейтронного пучка от регулярно упорядоченных нано структурированных объектов на поверхности и в приповерхностном слое, а также сравнение полученных результатов с реальным экспериментом и DWBA моделированием. Основными преимуществами модифицированного кинематического приближения является возможность моделирования сложных систем без построения корреляционной функции [1] и расчет зеркального отражения недоступного в DWBA методе.

Проведен анализ возможных модификаций кинематического приближения с целью улучшения согласия результатов моделирования с экспериментом: учет эффекта преломления нейтронной волны на границах раздела сред (особенно важно для систем с большими значениями плотности длины рассеяния); введение эффективной «глубины проникновения» нейтронной волны; перенормировка результатов для сигнала не зеркального рассеяния на основе данных, полученных для зеркального канала. Показано, что во многих случаях удается получить неплохое согласие с экспериментальными данными, а также с методами DWBA и расчетами на основе алгоритма Парратта.

1. А. В. Белушкин, С. А. Маношин, В. С. Рихвицкий, Кристаллография, том 61 № 5, 736 (2016).

Генерация быстрых нейтронов при помощи пьезоэлектрического эффекта

К. А. Вохмянина¹, М. Б. Громов², О. О. Иващук¹, И. А. Кищин^{1, 3},
А. С. Ключев¹, А. С. Кубанкин^{1, 3}, Р. М. Нажмудинов^{1, 3},
А. Н. Олейник¹, А. С. Чепурнов^{1, 2}, А. В. Щагин^{1, 4}

¹ Лаборатория радиационной физики Белгородского государственного национального исследовательского университета, Белгород, Россия

² Научно-исследовательский институт им. Д. В. Скобелева МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Троицк, Москва, Россия

⁴ Харьковский физико-технический институт, Харьков, Украина

Пьезоэлектрические кристаллы, такие как танталат лития (LiTaO_3), могут использоваться для инициирования D-D реакции синтеза [1, 2]. Одним из продуктов реакции являются быстрые нейтроны с энергией 2.45 МэВ. Генерация нейтронов осуществляется при помощи пьезоэлектрического эффекта – электризации пьезоэлектрика при изменении его температуры. Это приводит к генерации сильного электрического поля порядка 10^5 В/см, достаточного для ионизации молекул остаточного газа. Дополнительными условиями для осуществления D-D реакции являются наличие в качестве окружающего газа дейтерия при давлении порядка 10^{-3} торр, а также наличие мишени, содержащей дейтерий. Для более эффективной ионизации дейтерия на поверхность кристалла устанавливается дополнительный ионизатор.

Представлены результаты экспериментов по генерации нейтронов при помощи пьезоэлектрического эффекта при использовании различных ионизаторов (вольфрамовые наноотстрия, углеродные нанотрубки).

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (РНФ, проект № 16-19-10535).

1. Naranjo B., Gimzewski J., and Putterman S. "Observation of nuclear fusion driven by a pyroelectric crystal," Nature, 434, pp. 1115-1117 (2005).
2. Geuther J., Danon Y., and Saglime F. "Nuclear reactions induced by a pyroelectric accelerator," Phys. Rev. Lett. 96, 054803 (2006).

Численное моделирование спин-эхо-спектрометра для реактора ПИК

К. А. Павлов, С. В. Григорьев, Е. В. Москвин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время в Петербургском институте ядерной физики (НИЦ КИ ПИЯФ) ведутся работы по проектированию исследовательских установок нейтронного рассеяния для высокопоточного реактора ПИК. В их числе – спектрометр, реализованный на методике нейтронного спинового эха. В данной работе проведено сравнение двух возможных реализаций метода – классической (NSE) и резонансной (NRSE). Для известного спектра источника холодных нейтронов канала ГЭК-3, на котором предполагается разместить установку, и заданной конфигурации магнитного поля в элементах прецессии определены рабочий диапазон и геометрические параметры установки. Создана модель прибора в среде McStas, реализующей численное моделирование нейтронного рассеяния методом Монте-Карло. Сформулированы рекомендации к проектированию нейтронновода и оптических элементов для нейтронного спин-эхо спектрометра на реакторе ПИК.

Времяпролетный спектрометр нейтронов на реакторе ПИК

А. О. Петрова, П. И. Коник, Е. В. Москвин

*Петербургский институт ядерной физики
им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

В связи с завершением строительства реактора ПИК начаты предварительные работы по проектированию инструментов второй очереди, в состав которой в том числе входит времяпролетный спектрометр.

Спектрометр по времени пролета предназначен для экспериментов в области квазиупругого рассеяния. Для оптимизации работы прибора построена математическая модель, основанная на обзоре статей и их дальнейшем анализе, позволяющая вычислять разрешение и интенсивность на образце при известных параметрах прибора. Основным элементом спектрометра по времени пролета является каскад дисковых прерывателей, чей вклад в разрешение рассчитан и представлен в данной работе. На основе анализа математической модели получено, что, увеличив расстояние между основными дисковыми прерывателями, можно заметно увеличить интенсивность в импульсе, при этом сохранив разрешение. Оптимальное значение расстояния между прерывателями задается расстоянием между образцом и детектором, которое в свою очередь продиктовано в основном доступным местом в нейтронном зале и стоимостью детектора. Для установленного значения расстояния между образцом и детектором в 3,5 м, оптимальное расстояние между прерывателями оказывается около 30 м, и вследствие этого времена открытия на основных прерывателях отличаются друг от друга в 10 раз.

В данной работе представлена предварительная модель времяпролетного спектрометра, разработанная на основе аналитического метода оптимизации, и кратко представлен сам алгоритм поиска оптимальных параметров. Также представлены первые результаты моделирования работы времяпролетного спектрометра методом Монте-Карло.

Моделирование ультрамалоуглового дифрактометра SESANS для РК ПИК

*Е. Е. Рувинская^{1, 2}, К. А. Павлов^{1, 2}, В. Н. Забенкин¹,
Л. А. Аксельрод¹, Е. В. Москвин^{1, 2}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

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

В настоящее время в Петербургском институте ядерной физики (ПИЯФ НИЦ КИ) подходит к концу строительство высокопоточного реактора ПИК. На выведенных нейтронных пучках планируется обустройство большого количества экспериментальных станций для исследований в области физики конденсированного состояния вещества. Одним из таких приборов должен стать ультрамалоугловой дифрактометр SESANS, предназначенный для исследования неоднородностей в веществе и корреляций в их расположении на масштабах от 20 нм до 20 мкм. В качестве объектов исследования на данной установке могут выступать пористые и мембранные системы, конструкционные материалы, лекарственные препараты в твердой и жидкой фазе.

Характерной чертой метода спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов является кодирование угла рассеяния с помощью ларморовской прецессии магнитного момента нейтрона. Для создания прибора на реакторе ПИК была выбрана конфигурация методики, использующая белый спектр излучения, разрешаемый по времени пролёта. Для заданных величин магнитного поля в элементах прецессии и их геометрических параметров были рассчитаны рабочий диапазон установки и пространственно-временные характеристики системы прерывателей. Создана математическая модель прибора в программном пакете McStas, реализующем численное моделирование методом Монте-Карло для нейтронного рассеяния. Из проведённых вычислений сформулированы рекомендации к созданию индивидуального нейтронновода для установки.

Особенности магнитного рассеяния нейтронов на промежуточно-валентных соединениях самария и европия

П. С. Савченко¹, П. А. Алексеев²

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Проанализированы особенности магнитного формфактора, определяющего зависимость интенсивности магнитного рассеяния нейтронов от переданного импульса. Предложены модельные подходы, позволяющие с единой позиции квантово-механически смешанной волновой функции, описывающей промежуточно-валентного состояние, объяснить наблюдаемые эффекты в неупругом магнитном рассеянии нейтронов SmB_6 и EuCu_2Si_2 .

Работа частично поддержана грантом РФФИ 14-02-00272-а.

1. Alekseev P.A., Mignot J.-M., Savchenkov P.S. et al. // *Jetp Lett.* 103 (2016) 636.

2. A. Alekseev, K.S. Nemkovski et al. // *J. Phys.: Condens. Matter* 24 (2012) 375601.

Структура точечных примесных центров в $Y_3Al_5O_{12}$

А. В. Сердцев, В. А. Чернышев

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

Кристаллы $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG), активированные редкоземельными ионами, привлекают внимание исследователей как перспективные лазерные материалы [1]. Кристаллическое поле на примесном ионе в существенной степени определяется его ближайшим окружением – лигандами и следующими за ними ионами. Для исследования электронного спектра примесных центров необходима информация об их локальной кристаллической структуре.

В работе проводится моделирование кристаллической структуры примесных центров R^{3+} в $Y_3Al_5O_{12}$ из «первых принципов», в рамках МО ЛКАО подхода, теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3PW.

Ab initio расчеты были проведены в программе CRYSTAL [2], предназначенной для моделирования периодических структур.

Расчеты предсказывают, что искажение кристаллической решетки в примесных центрах R^{3+} в основном локализовано в пределах двух координационных сфер. Замещение иттрия ионом R^{3+} ($R = La - Ho$) приводит к расширению 1-2 координационных сфер в пределах 0.1 Å и снижается от лантана к гольмию (изменение длин связей с лигандами составляет менее 5 %). При замещении иттрия изовалентным ионом эрбия искажение практически отсутствует. В случае замещения ионом R^{3+} ($R = Tm - Lu$), расчеты предсказывают сжатие первых двух координационных сфер в пределах 0.02 Å, увеличивающееся от тулия к лютецию.

Результаты могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных и предсказания свойств лазерных материалов YAG: R^{3+} .

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/К) и стипендии УрФУ за достижения в научной деятельности.

1. M. Kienel et al., Opt. Lett. 39, 3278 (2014).
2. R. Dovesi et al., Int. J. Quantum Chem. 114, 1287 (2014).

Новая линейка устройств в компактном формфакторе для автономных встраиваемых систем с интенсивной обработкой сигналов

А. В. Сизов

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

На сегодняшний день компания “С.А.Е.Н. S.p.A” является лидером в разработке и производстве современных электронных приборов для физики высоких энергий и ядерной физики [1]. Следует отметить, что более 20 % продукции разработано по заявкам ученых физиков-экспериментаторов, а почти половина поставляется со специальной адаптацией к конкретным экспериментам.

В рамках действующего проекта по адаптации и модернизации экспериментальных установок для реактора ПИК, перевезенных из Германии, неизбежно возникнет необходимость в создании детектора нового поколения и оснащении его «умной» электроникой, которая способна не только регистрировать, но и анализировать форму сигналов в режиме реального времени, что позволит на несколько порядков подавить фон и выделить интересующие нас события.

В связи с этим предлагается рассмотреть возможность использования следующей продукции:

1. высоковольтные источники питания стандарта NIM, VME и настольные программы управления;
2. приборы цифровой обработки сигналов;
3. крейты NIM, VME и крейты смешанного питания;
4. аппаратура для предусиления и усиления исследуемых сигналов.

Более тесная связь с дистрибьюторами компании “С.А.Е.Н. S.p.A” позволит открыть сервисный центр по обслуживанию и поддержке продукции “CAEN”.

1. CAEN S.p.A. Via Vetràia, 11 - 55049 Viareggio (LU) – ITALY www.caen.it

Конструкция для приложения электрического поля к образцу при проведении экспериментов по рассеянию рентгеновского излучения

С. А. Удовенко¹, Д. А. Андроникова^{1, 2}, С. Б. Вахрушев^{1, 2}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Сегнетоэлектрические материалы широко изучаются исследователями со всего мира. Интерес к этим материалам вызван тем, что сегнетоэлектрики обладают пьезоэффектом, рекордными значениями диэлектрической проницаемости [1]. В нашей лаборатории мы исследуем свинецсодержащие перовскиты методом дифракции рентгеновского излучения при помощи монокристалльного дифрактометра SuperNova Oxford Diffraction [2], в частности, цирконат-титанат свинца, который является лидером на рынке пьезоэлектрических материалов. Интересной задачей является исследование перестройки структуры, сопровождающей фазовые переходы в сегнетоэлектрических и антисегнетоэлектрических материалах во внешних электрических полях при высоких температурах. Для приложения внешнего электрического поля к образцу необходима специальная конструкция, которая удовлетворяла бы следующим требованиям:

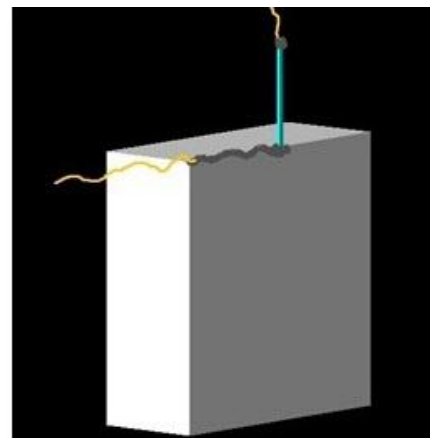
1. обеспечивать сканирование образца рентгеновским лучом в максимально возможном диапазоне углов, при этом луч не должен в процессе сканирования попадать на части конструкции;

2. выдерживать нагрев до 500 °С и обеспечивать хорошую теплопередачу от нагревателя к образцу;

3. иметь габаритные размеры, позволяющие проводить эксперимент в небольшом лабораторном дифрактометре;

4. обеспечивать надежный электрический контакт между образцом и источником напряжения.

Нашим коллективом была разработана конструкция, удовлетворяющая перечисленным требованиям. На рис. изображена предлагаемая нами конструкция.



Электрическая ячейка (слева) и подложка с образцом (справа)

1. В.В. Пасынков, В.С. Сорокин, «Материалы электронной техники», СПб, Лань 2001.

2. <http://www.oxford-diffraction.com/supernova.php>

Моделирование миграционных процессов в почве с помощью методов современной динамики

Т. В. Шаранова, Р. С. Макин, А. С. Шаранов

*Дмитровградский инженерно-технологический институт НИЯУ МИФИ,
Дмитровград, Россия*

В настоящее время отсутствует достаточная информация о параметрах миграционных процессов в почвах, что затрудняет решение задач по предотвращению последствий радиоактивного загрязнения.

Модели, основанные на гауссовском (нормальном) распределении, не учитывают множество важных факторов, которые могут повлиять на миграцию радионуклидов в почве.

Диффузионные процессы радионуклидов в почве существенно не гауссовы. При нулевой связности $\theta = 0$ процесс переноса становится диффузионным:

$$\langle \vec{r}^2(t) \rangle = 2D \times t^1. \quad (1)$$

Линейная зависимость (1) среднеквадратического смещения частиц от времени достигается за счет сложной «игры» корреляций, действующих на сколь угодно больших пространственных масштабах $\vec{r} \rightarrow \infty$. Таким образом, процессы в почве являются странными в широком смысле.

$$\int d\vec{r} \psi(\vec{r}, t) = 1. \quad (2)$$

Почва в данном случае рассматривается как самоподобное фрактальное множество, а радионуклид – как точечная частица.

Уравнение (2) для странных, не гауссовых, диффузионных процессов (1) не справедливо.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \Delta_{\kappa}(B\psi). \quad (3)$$

Последовательный учет корреляций требует отказа от гауссова диффузионного уравнения (3) и традиционного представления о процессах переноса как о случайном броуновском движении частиц в среде.

Также не определена «размерность самой почвы», что важно для описания геометрии распределения радионуклидов в почве.

Использование нестандартных подходов к изучению миграции радионуклидов в почве позволит реализовать более точные оценки параметров миграционных процессов в почвах, и оценить, насколько изменятся результаты, полученные в рамках традиционного подхода.

1. L. M. Zeleny, Fractal topology and strange kinetics. 852, (2014).
2. S. P. Kuznetsov, Dynamic chaos. 355, (2006).
3. A. M. Nahushev, Fractional calculus and its application. 272, (1998).

Принцип построения и оптимизация порошкового дифрактометра на холодных нейтронах

Ю. А. Шмидт, П. И. Коник, Е. В. Москвин

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Порошковая дифракция является широко используемым методом для изучения конденсированного состояния вещества. В ближайшем будущем планируется запуск реактора ПИК, а также установка, как минимум, трёх дифрактометров. Оптимизация прибора позволит максимально использовать предоставленные ресурсы реактора и решать широкий спектр задач, возникающих в современной науке конденсированного состояния.

В работе рассмотрены различные подходы к выбору параметров приборов, а также приведён новый алгоритм оптимизации прибора, который базируется на выборе наибольшей интенсивности прибора на заданном диапазоне углов с заданным разрешением. Для получения входных данных для данной задачи была проанализирована открытая кристаллографическая база. Используя статистику по 350 000 образцам были выбраны оптимальные значения для характеристик приборов. Основываясь на этом, мы можем статистически полагать, что построенная по данным параметрам приборная база сможет качественно решить любую поставленную перед ней задачу.

Также в работе были изучены возможности варьирования параметров приборов и использование нестандартных коллиматоров. Перспективным направлением в этом исследовании является введение изменяемого по углу коллиматора, устанавливаемого перед детектором.

Для решения вопроса ограниченности пространства в реакторном зале реактора ПИК нами так же начато исследование нестандартных геометрий в порошковых дифрактометрах.

Конечной целью данной работы являются рекомендации по строительству высокоразрешающего и высокоинтенсивного порошковых дифрактометров на тепловых.

Частотно-временной вейвлет-анализ в рефлектометрии для определения слоевого упорядочения в тонких пленках

С. Б. Астафьев, Л. Г. Янусова

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

В отличие от оконного преобразования Фурье, вейвлет-преобразование [1] одномерных сигналов обеспечивает переменное разрешение сразу в двух пространствах, что позволяет выявлять локальные особенности этих сигналов. Показано, что при двумерном преобразовании экспериментальной кривой интенсивности зеркального отражения в зависимости от угла падения и пространственной частоты (координаты) возможно определение не только толщины, но и порядка следования отдельных слоёв с характерным поведением электронной плотности, что в ряде случаев позволяет восстановить электронный профиль плёнки в целом. В программном комплексе BARD [2] авторами был реализован весь спектр вейвлет-преобразований, разработанный в настоящее время, благодаря чему при исследовании слоистых структур методами рефлектометрии возможно использовать вейвлеты разнообразной формы в зависимости от характера выявляемой особенности исследуемого сигнала.

В работе на примере модели четырёхслойной плёнки толщиной 310 Å (толщины слоёв 50, 70, 90 и 100 Å) показано применение частотно-временного вейвлет-преобразования. Если среди десяти экстремумов автокорреляционной функции ($M=N(N+1)/2$, $N=4$) выявить толщины четырёх слоёв модельной плёнки представляется проблематичным, не говоря уже о их расположении, то использование вейвлет-преобразования даёт чёткую картину толщин и порядка следования слоёв. Пик, соответствующий слою толщиной $Z=90$ Å проявляется при меньших величинах q_z , следовательно, этот слой располагается первым на пути распространения рентгеновского луча. Аналогичным образом определяется последовательность слоёв считая от границы воздух-плёнка: {90, 70, 50, 100}. Таким образом, профиль модели четырёхслойной плёнки оказывается полностью восстановлен.

1. Астафьева Н.М., УФН, 1145, 166, (1996).

2. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г., Прикладная математика и информатика, МАКС Пресс М., 66, 44, (2013).

Список участников

ФИО	Организация	E-mail	стр.
Gukasov Arsen Grigor'evich	LLB	arsen.goukassov@cea.fr	10
Humbatov Shirkhan Arastun	BSU	shirxan-humbatov@mail.ru	
Huseynova Vusale Kamal	BSU	yusifali@pochta.ru	104
Ivanov Alexandre	ILL	aivanov@ill.fr	
Nabiyev Asif Arasli	JINR	asifnebi@gmail.com	44
Nikiforova Nadejda Nikolaevna	PCPRC NUU	nikiforovann@mail.ru	203
Norbayev Saidbek Ulugbek ogli	NUU	luxwawe17@mail.ru	171
Oksengendler Boris Leonidovich	PCPRC NUU	oksengendlerbl@yandex.ru	16
Popov Alexander N.	ESRF	apopov@esrf.fr	
Wolff Maximilian Peter Wilhelm	Uppsala University	max.wolff@physics.uu.se	
Абасзаде Рашид Габил оглы	НАНА	Abaszade@rambler.ru	175
Абдулвахидов Башир Камалудинович	ДГУ	babdulvakhidov@mail.ru	177
Абдулкадирова Нурижат Зулпикаровна	ИФ ДНЦ РАН	nnurizhat@mail.ru	94
Абдуллаев Гаджимурад Оруджович	ИФ ДНЦ РАН	abd.gm90@yandex.ru	176
Абубакаров Абу Геланиевич	ЮФУ	abubakarov9561@gmail.com	
Абиев Афсун Сахават оглы	БГУ	abiyevafsun@gmail.com	25
Аветисов Владик Аванесович	ИХФ РАН	vladik.avetisov@gmail.com	4
Адельсон Вероника Яковлевна	СПбГУ	adelson_v@outlook.com	161
Азарова Любовь Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	loveazarova@gmail.com	26
Акимова Ксения Андреевна	МГУ	Kseniia.Akimova@gmail.com	54
Аксельрод Леонид Абрамович	ПИЯФ НИЦ КИ	axselrod_la@pnpi.nrcki.ru	

Аксенов Виктор Лазаревич	ПИЯФ НИЦ КИ	aksenov_vl@pnpi.nrcki.ru	
Аксенов Сергей Михайлович	ИК РАН	aks.crys@gmail.com	55
Актерский Андрей Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	aau2002@yandex.ru	
Алексеева Ольга Александровна	СПбПУ	blackhole2010@yandex.ru	56
Алигулиева Хаяла Вагиф	НАНА	xayala-firuza@mail.ru	
Алисултанов Заур Замирович	ИФ ДНЦ РАН	zaur0102@gmail.com	178
Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@lns.pnpi.spb.ru	
Алыев Юсиф Имрайылоглу	НАНА	yusifafshar@gmail.com	179
Амарантов Сергей Владимирович	ИК РАН	amarantov_s@mail.ru	162
Амиров Абдулкарим Абдулнатилович	ИФ ДНЦ РАН	amiroff_a@mail.ru	96
Анохин Андрей Сергеевич	ЮНЦ РАН	anokhin.andrey@gmail.com	
Антонов Николай Евгеньевич	СПбПУ	zergiummail@mail.ru	225
Аргымбек Байболат Кайратулы	ОИЯИ	argymbek92@mail.ru	27
Арефьев Михаил Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	arefievm@mail.ru	58
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	aristov@thd.pnpi.spb.ru	
Аюбова Гулар Шамшаддин кызы	Национальное аэрокосмическое агентство Азербайджана	fizik-3@mail.ru	
Бабинцев Илья Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	il2b@rambler.ru	180
Бельтюков Артемий Николаевич	ФТИ УрО РАН	beltukov.a.n@gmail.com	59
Блатов Алексей Александрович	НМУ	al-blatov@yandex.ru	181
Бойцова Ольга Владимировна	МГУ	boytsova@gmail.com	97
Бокучава Гизо Дазмирович	ОИЯИ	gizo@nf.jinr.ru	

Бондарев Алексей Владимирович	ВГТУ	bondarev@vmail.ru	182
Борисов Сергей Аркадьевич	ФТИ РАН	sborisov@yandex.ru	
Боркунов Родион Юрьевич	БФУ	rborkunov@mail.ru	
Бочаров Дмитрий	ИФТТ Латвийского университета	bocharov@latnet.lv	183
Бугров Александр Николаевич	ИВС РАН	bugrov.an@mail.ru	28
Булавин Максим Викторович	ОИЯИ	bulavin85@inbox.ru	
Булаева Елена Александровна	ЧелГУ	dezwork@gmail.com	60
Булат Наталья Витальевна	ЮФУ	natty.bu@yandex.ru	61
Быков Алексей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	redi87@bk.ru	226
Быков Эдуард Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	mcgector@yandex.ru	
Валеев Ришат Галеевич	ФТИ УрО РАН	rishatvaleev@mail.ru	98
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	99
Ванина Полина Юрьевна	СПбПУ	p.yu.vanina@gmail.com	29
Васильев Андрей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	aivasilev92@mail.ru	
Васильев Сергей Александрович	ТьГУ	vsa812@yandex.ru	227
Васильева Юлия Андреевна	МГСУ	juliet-95vasilisa@yandex.ru	100
Васин Михаил Геннадьевич	ФТИ УрО РАН, ИФВД РАН	dr_vasin@mail.ru	5
Вахрушев Сергей Борисович	ФТИ РАН	s.vakhrushev@mail.ioffe.ru	6
Волков Владимир Владимирович	ИК РАН	volkicras@mail.ru	8
Воробьев Алексей Александрович	Университет Упсала	avorobiev@ill.fr	
Ворошнин Владимир Юрьевич	СПбГУ	Vl.Voroshnin@yandex.ru	228
Выговский Эдуард Сергеевич	БФУ	edik540@yandex.ru	
Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	gavrilov_sv@pnpi.nrcki.ru	

Гайсин Айдар Уралович	ПИЯФ НИЦ КИ	darikgais@gmail.com	230
Гашимов Ровшан Фикрет оглы	ИФ НАНА	rovshan.hashimov@physics.science.az	30
Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gerashchenko_ov@pnpi.nrcki.ru	
Гильмияров Марат Рафаэлевич	ПИЯФ НИЦ КИ	marat.gilmiyarov95@gmail.com	
Гильмутдинов Ильдар Фаритович	КФУ	ildar.gilmutdinov@gmail.com	
Глебова Ирина Борисовна	ИХС РАН	iraglebova@mail.ru	62
Глушкова Александра Константиновна	ДИТИ НИЯУ МИФИ	aleksandra.glushkova@rambler.ru	
Голосовский Игорь Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	golosovsky_iv@pnpi.nrcki.ru	
Голубева Ксения Вячеславовна	ДИТИ НИЯУ МИФИ	ponakshinakv@yandex.ru	163
Голушко Иван Юрьевич	ЮФУ	vaniagolushko@yandex.ru	164
Гончарова Анна Сергеевна	МГУ	goncharoAS@gmail.com	101
Горкунов Максим Валерьевич	ИК РАН	gorkunov@crys.ras.ru	
Горный Игорь Викторович	ФТИ РАН, ТКМ (KIT)	gornyi@tkm.uni-karlsruhe.de	9
Горьковая Екатерина Дмитриевна	ЮФУ	ekaterina_gorkovaya@mail.ru	63
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	19, 20
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Григорькин Алексей Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ale-grig@yandex.ru	184
Гришина Анастасия Евгеньевна	СПбГУ	grinassia@mail.ru	102
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	103
Гурьева Полина Викторовна	НИЦ КИ	poli.b3@gmail.com	64
Гусейнов Гусейн Джалил	НАНА	huseyn-1978@mail.ru	
Гущин Максим Сергеевич	ВГУ	gushinmax@yandex.ru	165
Данилов Игорь Владимирович	ИФВД РАН	idanilov@hppi.troitsk.ru	106

Дарьин Федор Андреевич	ИЯФ СО РАН	fdaryin@gmail.com	
Дегтяренко Алёна Юрьевна	НИЦ КИ	ALevakhova@gmail.com	107
Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	185
Дерец Никита Кириллович	СПбГУ	marshalrets@mail.ru	
Джабаров Сакин Гамид оглы	ИФ НАНА	sakin@jinr.ru	31
Диденко Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	didenko_gp@pnpi.nrcki.ru	
Дмитренко Иван Павлович	ЮФУ	vanekdmitrenko@gmail.com	11
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	
Довженко Глеб Денисович	ПИЯФ НИЦ КИ	dovjenko.g@gmail.com	
Долгаков Иван Александрович	СПбПУ	dolgakovv@gmail.com	32
Долганов Павел Владимирович	ИФТТ РАН	pauldol@issp.ac.ru	
Дорошкевич Александр Сергеевич	ОИЯИ	doroh@jinr.ru	33
Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	32167i@mail.ru	34
Дубовский Игнат Максимович	ПИЯФ НИЦ КИ	qwor@yandex.ru	
Дьякова Екатерина Владимировна	ТьГУ	e-v-dyakova@yandex.ru	186
Елисеев Артем Анатольевич	МГУ	artem.a.eliseev@gmail.com	108
Ельникова Лилия Вячеславовна	НИЦ КИ ИТЭФ	elnikova@itep.ru	187
Ерофеев Дмитрий Александрович	ИСАН	kinson@mail.ru	109
Естюнин Дмитрий Алексеевич	СПбГУ	estyunin@gmail.com	110
Жилеева Эльвира Александровна	ЮФУ	wonderfullife.bluesky@mail.ru	
Жилова Ольга Владимировна	ВГТУ	zhilova105@mail.ru	188
Жумаев Мустахим Рафиевич	БухИТИ	mrjumaev2011@mail.ru	189

Журавлева Ксения Николаевна	СамГУ	zhrvlvksenia@gmail.com	
Завьялова Анастасия Юрьевна	СПбГЭТУ «ЛЭТИ»	zaviyalova.a.y@mail.ru	111
Закурдаева Регина Искандеровна	УлГПУ	r.tukhvatova@yandex.ru	
Захарова Анна Владимировна	ПИЯФ НИЦ КИ	annyy50@icloud.com	65
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	Zobkalo_IA@pnpi.spb.ru	
Ибрагимов Бейбут Гусейн оглы	НАНА	behbud.ibrahimov.93@mail.ru	
Ибрагимова Милана Абасовна	Астанинский филиал ИЯФ	i.m.13@bk.ru	190
Ибраева Анель Динмухамедовна	Астанинский филиал ИЯФ	anelusha1991@mail.ru	112
Иванова Наталья Анатольевна	НИЯУ МИФИ	uran-o2@yandex.ru	231
Иваньков Александр Игоревич	ОИЯИ	ivankov@jinr.ru	66
Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН	ivitcheva@mail.ru	35
Ильин Дмитрий Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	digatchi@list.ru	232
Иоффе Александр	ИК РАН	a.ioffe@fz-juelich.de	
Ипатов Дмитрий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	starkylove@yandex.ru	
Исаева Татьяна Андреевна	СамГУ	tatiana.isaeva2010@yandex.ru	
Исмайлова Нармин Ариф	ИЯ НАНА	ismayilova_narmin_84@mail.ru	191
Кавокин Кирилл Витальевич	ФТИ РАН	kkavokin@gmail.com	12
Казаков Евгений Алексеевич	ЮФУ	Sechevik@gmail.com	233
Каланда Николай Александрович	НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	kalanda@ifftp.bas-net.by	113
Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	
Калонов Азамбек Атхамович	УрФУ	azambek-k@mail.ru	
Канюков Егор Юрьевич	НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	ka.egor@mail.ru	114

Каплий Анна Андреевна	БелГУ	ann.kapliy@mail.ru	192
Картапова Татьяна Сергеевна	ФТИ УрО РАН	radostinka301@yandex.ru	115
Каширин Максим Александрович	ВГТУ	mnitro@yandex.ru	
Киреенко Юрий Михайлович	ПИЯФ НИЦ КИ	osnerde@gmail.com	
Киряков Арсений Николаевич	УрФУ	arseny.kiriakov@urfu.ru	
Киселев Игорь Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	igkiselev@gmail.com	
Киселев Михаил Николаевич	ИСТР	mkiselev@ictp.it	13
Кишин Иван Александрович	БелГУ	ivan.kishin@mail.ru	67
Киямов Айрат Газинурович	КФУ	airatphd@gmail.com	116
Клюева Мария	НИТУ «МИСиС»	23sh82vd@gmail.com	117
Князева Мария Александровна	СПБПУ	kniazeva.maria225@yandex.ru	68
Кожанов Антон Андреевич	ДИТИ НИЯУ МИФИ	anton7071@yandex.ru	36
Козлов Валерий Степанович	ПИЯФ НИЦ КИ	kozlov_vs1@pnpi.nrcki.ru	118
Козлов Даниил Андреевич	МГУ	kozlov@inorg.chem.msu.ru	119
Козловская Ксения Александровна	МГУ	kozlovskaya@physics.msu.ru	
Козловский Артем Леонидович	ЕНУ	artem88sddt@mail.ru	193, 194
Колпачева Наталия Алексеевна	ЮФУ	kolpacheva.natalia@gmail.com	
Конарев Петр Валерьевич	ИК РАН	konarev@ns.crys.ras.ru	234
Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	
Коняхин Сергей Васильевич	СПБАУ РАН	kon@mail.ioffe.ru	195
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@lns.pnpi.spb.ru	37
Коршунов Артём Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	artem.korshunov91@gmail.com	38
Костюченко Сергей Андреевич	МГУ	seriykostu4enko@gmail.com	120

Красникова Юлия Владимировна	ИФП РАН, НИУ ВШЭ	krasnikovamipt@gmail.com	39
Крившич Анатолий Григорьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	krivshich_ag@pnpi.nrcki.ru	
Крылова Екатерина Александровна	СПбГУ	krylovaea2803@mail.ru	121
Крюкова Алёна Евгеньевна	ИК РАН	Alenka3112007@yandex.ru	235
Кудлис Андрей	СПбГУ	andrewkudlis@gmail.com	196
Кузнецов Виталий Сергеевич	ОИЯИ	vitak@jinr.ru	41
Курбаков Александр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru	
Курицын Александр Геннадьевич	СПбГУ	kuritsyn_alex@mail.ru	122
Кучугура Мария Дмитриевна	ПИЯФ НИЦ КИ	mariya_kuchugura@mail.ru	123
Лазаренко Владимир Александрович	НИЦ КИ	vladimir.a.lazarenko@gmail.com	70
Лазебник Иосиф Моисеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	lazebnik_IM@pnpi.nrcki.ru	
Лебедев Василий Александрович	МГУ	vasya_lebedev@mail.ru	124
Леонтьев Алексей Павлович	МГУ	leontyevalecsey@mail.ru	125
Литвиненко Глеб Витальевич	НИТУ «МИСиС»	gleb.litvinenko@gmail.com	126
Литягин Георгий Александрович	СПбПУ	lityagin.g@yandex.ru	71
Лихачев Дмитрий Юрьевич	СПбГУ	l_d_u@mail.ru	42
Лихолетова Елена Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	likholetova@lns.pnpi.spb.ru	
Лобанова Евгения Юрьевна	СПбПУ	repkakkk2@yandex.ru	197
Лобова Анна Алексеевна	МГУ	annetta_lobova@mail.ru	73
Логинов Дмитрий Владимирович	ПетрГУ	logindm@mail.ru	74
Логинова Светлана Владимировна	ПетрГУ	svlog@petsu.ru	128
Лупицкая Юлия Александровна	ЧелГУ	lupitskaya@gmail.com	129

Львов Дмитрий Владимирович	ИТЭФ НИЦ КИ	lvov@itep.ru	43
Магомедова Наида Алиевна	ДГУ	betsa197809@mail.ru	
Майорова Анна Владимировна	ЦПИ, СПбПУ	kovtun_anna@bk.ru	21
Макагонов Владимир Анатольевич	ВГТУ	vlad_makagonov@mail.ru	130
Макаров Павел Андреевич	СГУ	makarovpa@syktsu.ru	198
Макарова Ирина Павловна	ИК РАН	makarova@crys.ras.ru	14
Максимова Анна Владимировна	ЮФУ	anyuto4ka2006@rambler.ru	131
Маношин Сергей Александрович	ОИЯИ	manoshin@nf.jinr.ru	236
Матасов Макс Дмитриевич	ПИЯФ НИЦ КИ	matasov_md@pnpi.nrcki.ru	199
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	75
Матвеева Алёна Александровна	ДИТИ НИЯУ МИФИ	alena_matveeva_2017@list.ru	166
Матвеева Анна Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	anyta_macarova1@mail.ru	
Матросова Мария Юрьевна	ДИТИ НИЯУ МИФИ	IVlary.IVlatr@yandex.ru	132
Мейримова Татьяна Юрьевна	Астанинский филиал ИЯФ	tanay_91@mail.ru	
Метлов Константин Леонидович	ДонФТИ	metlov@fti.dn.ua	22
Микаилова Амина Джумшуд	НАНА	mikayilova.a.c@gmail.com	167
Миндигулова Арина Александровна	ИЯФ СО РАН	arina-lobova@rambler.ru	169
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	
Митин Дмитрий Михайлович	СГУ	d1_man26@mail.ru	
Михайленко Евгений Константинович	СПбПУ	em-10@mail.ru	200
Михейкин Алексей Сергеевич	ЮНЦ РАН	aleksey.mikheykin@gmail.com	

Мишунин Максим Вадимович	БелГУ	maks_mish@mail.ru	76
Мищенко Илья Никитич	ФТИАН РАН	ИlyaMischenko@rambler.ru	170
Могилюк Тарас Игоревич	НИЦ КИ	5staras@mail.ru	201
Морозов Максим Сергеевич	СамГУ	maxymor@mail.ru	134
Москвин Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	moskvin_EV@pnpi.nrcki.ru	
Москвина Оксана Игоревна	ПИЯФ НИЦ КИ	moskvina@lns.pnpi.spb.ru	
Муслимов Арсен Эмирбегович	ИК РАН	amuslimov@mail.ru	77
Мухаметулы Багдаулет	ОИЯИ, КазНУ	bagdaulet_m@mail.ru	
Мухин Константин Александрович	ОИЯИ	kostik001@mail.ru	
Мухучев Абдула Ахмедович	ИФ ДНЦ РАН	mukhuch87@mail.ru	
Мыльникова Влада Андреевна	БФУ	len4211997@yandex.ru	
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru	
Нагорная Татьяна	ОИЯИ	tanya@nf.jinr.ru	
Нагорный Анатолий Васильевич	ОИЯИ	avnagorny@jinr.ru	
Назипов Дмитрий Валерьевич	УрФУ	qwear0@gmail.com	202
Незванов Александр Юрьевич	Université Grenoble Alpes	alexnezv@gmail.com	135
Николаев Сергей Николаевич	НИЦ КИ	niklser@list.ru	
Ниязов Рамиль Асхатович	ПИЯФ НИЦ КИ	ramilniyazov@gmail.com	204
Нухов Азим Кадимович	ДГУ	nukhov1984@mail.ru	205
Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyanikov_a_k@mail.ru	
Овчинникова Елена Николаевна	МГУ	ovtchin@mail.ru	
Окороков Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov_ai@pnpi.nrcki.ru	
Олейник Андрей Николаевич	БелГУ	andreyoleynik92@mail.ru	237
Онущенко Петр Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	petr.onushchenko@gmail.com	78

Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv76@mail.ru	136
Павленко Анатолий Владимирович	ЮНЦ РАН	tolik_260686@mail.ru	
Павлов Константин Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	orbita.pk@lns.pnpi.spb.ru	238
Перевозчикова Юлия Александровна	ИФМ УрО РАН	j-perevozchikova@mail.ru	206
Петров Владислав Павлович	УрФУ	lancervlad@gmail.com	207
Петрова Анита Олеговна	ПИЯФ НИЦ КИ	ani_petrova@mail.ru	239
Пилипенко Нелли Витальевна	ПИЯФ НИЦ КИ	nelly_p@list.ru	137
Пимонов Владимир Витальевич	ЮФУ	foxlightmanstudes@gmail.com	172
Письменный Владимир Викторович	БФУ	VVP--@mail.ru	
Платунов Михаил Сергеевич	ИФ СО РАН	ms-platunov@yandex.ru	
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pleshanov_nk@pnpi.nrcki.ru	
Подурец Константин Михайлович	НИЦ КИ	podurets@kcsr.kiae.ru	
Подчезерцев Станислав Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	stpcz@mail.ru	
Покоев Александр Владимирович	СамГУ	a.v.pokoev46@mail.ru	
Полушина Анастасия Дмитриевна	ФТИ РАН, СПбГЭТУ «ЛЭТИ»	nasa96@yandex.ru	138
Пономарева Алина Александровна	ДВФУ	ap_k@inbox.ru	
Поярков Андрей Александрович	МГУ	poyar.msu@gmail.com	139
Прядченко Василий Владимирович	ЮФУ	vvpryadchenko@sfedu.ru	
Пшеничный Кирилл Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	pshcyrill@mail.ru	208
Пыхтина Анна Ивановна	МФТИ (ГУ), Сколтех	pykhtina@yandex.ru	
Разумная Анна Григорьевна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	
Редьков Алексей Викторович	ИПМаш РАН	red-alex@mail.ru	79

Романова Таисия Андреевна	ФИАН	romanova.taisiya@gmail.com	210
Росляков Илья Владимирович	МГУ	ilya.roslyakov@gmail.com	
Рошаль Дарья Сергеевна	ЮФУ	rochal.d@yandex.ru	173
Рувинская Екатерина Егоровна	ПИЯФ НИЦ КИ	ruvinskaia.e.e@mail.ru	240
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov_vv@pnpi.nrcki.ru	
Рунова Маина Константиновна	ПИЯФ НИЦ КИ	runova_mk@pnpi.nrcki.ru	
Рыжов Вячеслав Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	46
Рябухина Марина Викторовна	ИФМ УрО РАН	ryabukhina@imp.uran.ru	
Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ НИЦ КИ	savitska@inbox.ru	
Савченков Павел Сергеевич	НИЯУ «МИФИ»	savch92@gmail.com	241
Саламатин Денис Александрович	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	47
Саунина Светлана Ивановна	ЧелГУ	saunina@csu.ru	
Сафиулина Ирина Альбертовна	ПИЯФ НИЦ КИ	ira93@inbox.ru	48
Светогоров Роман Дмитриевич	НИЦ КИ	rdsvetov@gmail.com	80
Селезнева Елена Вячеславовна	ИК РАН	MsDmitrichEva@yandex.ru	81
Сёмкин Михаил Александрович	УрФУ	m.a.semkin@urfu.ru	49
Сердцев Александр Вячеславович	УрФУ	saxara1994@yandex.ru	242
Сжогина Алина Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	allin_ok2@mail.ru	140
Сиделёв Дмитрий Владимирович	ТПУ	sidelevdv@tpu.ru	141
Сизанов Алексей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	alexey.sizanov@gmail.com	
Сизов Александр Вячеславович	ПИЯФ НИЦ КИ	sizoffav1@mail.ru	243
Сирота Марина Александровна	ЮФУ	mari.sirota@ya.ru	142

Скворцов Владимир Владимирович	НИТУ «МИСиС»	vladimir.skvortcov@gmail.com	
Скиданенко Анна Валентиновна	ЮФУ	ann.skidanenko@yandex.ru	211
Ской Вадим Вадимович	Университет «Дубна»	vskoj@yandex.ru	83
Скорикова Ниёле Станиславовна	ПетрГУ	nielik@mail.ru	84
Смыслов Руслан Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	urs1968@gmail.com	143
Соколов Александр Иванович	СПбГУ	ais2002@mail.ru	
Солобай Анастасия Андреевна	НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	catacore@mail.ru	144
Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	aosorokin@gmail.com	18
Сороколетов Дмитрий Сергеевич	ИЯФ СО РАН	D.S.Srkv@yandex.ru	
Сотникова Валентина Сергеевна	БелГУ	ultra5310@rambler.ru	212
Сотничук Степан Владимирович	МГУ	sotnya777@mail.ru	146
Срабионян Василий Валерьевич	ЮФУ	vvsrab@sfedu.ru	
Стекленева Любовь Сергеевна	ВГТУ	lubov_stekleneva@mail.ru	
Стерлягова Анна Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	steshan23@yandex.ru	
Суворова Екатерина Николаевна	частное лицо	suvorovacatherine@gmail.com	
Сулейманов Наиль Муратович	КФТИ КНЦ РАН	nail.suleimanov@mail.ru	
Сундеев Роман Вячеславович	МИРЭА	sundeev55@yandex.ru	86
Сурова Людмила Сергеевна	СПбГУ	liudmilasurova@gmail.com	147
Сухарина Галина Борисовна	ЮФУ	sukharina@mail.ru	87
Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ НИЦ КИ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru	
Сыртанов Максим Сергеевич	ТПУ	maxim-syrtanov@mail.ru	88

Тавторкина Татьяна Андреевна	ПИЯФ НИЦ КИ	Jiatta@yandex.ru	
Таланов Михаил Валерьевич	ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	
Тарасюк Елена Владимировна	МГТУ	gepod@inbox.ru	148
Тарнавич Владислав Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@gmail.com	
Таровик Эрнест Григорьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	deriglazov_vv@pnpi.nrcki.ru	
Тимофеев Виктор Евгеньевич	ПИЯФ НИЦ КИ	timofeeviktor@gmail.com	213
Тихонов Юрий Андреевич	ЮФУ	tickhonov.yuri@yandex.ru	89
Топерверг Борис Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	boris.toperverg@rub.de	50
Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	turchenko@jinr.ru	
Тюлюсов Антон Николаевич	ИТЭФ НИЦ КИ	tyulyusov@itep.ru	51
Удовенко Станислав Александрович	СПбПУ	s_udovenko@mail.ru	244
Ульянов Владимир Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ulyanov_va@pnpi.nrcki.ru	
Упоров Сергей Александрович	ИМЕТ РАН	segga@bk.ru	
Утесов Олег Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	utiosov@gmail.com	214
Филатов Антон Александрович	МГУ	filatovanton16@gmail.com	149
Филоненко Елена Михайловна	ЧелГУ	ponochkachan@gmail.com	150
Фрейман Виталий Максимович	ПИЯФ НИЦ КИ	ivitalik@me.com	
Хайрзаманова Элина Эдуардовна	ЧелГУ	elina_130@mail.ru	90
Ханов Лазер Ниямудинович	ИФ ДНЦ РАН	hanov82@mail.ru	151
Царьков Максим Владимирович	БФУ	max.offreal@gmail.com	
Цвигун Наталья Викторовна	ИК РАН	n_tsvigun@mail.ru	152
Цыпильников Андрей Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	grifft92@gmail.com	215

Чалин Дмитрий Вадимович	ЮФУ	trust_no1.00@mail.ru	216
Чен Тэсик	МИРЭА	chen.tt@mail.ru	217
Чернецкая Мария Дмитриевна	ИЯФ СО РАН	chernetskaya36@gmail.com	91
Чернышев Владимир Артурович	УрФУ	vladimir.chernyshev@urfu.ru	218
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	
Чижиков Вячеслав Анатольевич	ИК РАН	chizhikov@ns.crys.ras.ru	219
Чуб Дмитрий Сергеевич	МИЦ Интеллектуальные материалы ЮФУ	dschub@sfedu.ru	
Чубова Надежда Михайловна	ПИЯФ НИЦ КИ	chubova@lns.pnpi.spb.ru	52
Чукавин Андрей Игоревич	ФТИ УрО РАН	andrey_chukawin@mail.ru	153
Чушкова Дарья Ивановна	НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	dashachushkova@gmail.com	155
Шагинян Василий Робертович	ПИЯФ НИЦ КИ	vrshag@thd.pnpi.spb.ru	220
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	ПИЯФ НИЦ КИ	shapiro@mail.ru	221
Шарапов Анатолий Сергеевич	ДИТИ НИЯУ МИФИ	ddsk86@mail.ru	
Шарапова Татьяна Валерьевна	ДИТИ НИЯУ МИФИ	tatyana.starckina2010@yandex.ru	245
Шарипов Мирзо Зокирович	БухИТИ	m.z.sharipov@rambler.ru	
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ РАН	mischar@mail.ioffe.ru	92
Шахбанова Селимат Габидуллаевна	СамГУ	Shakhbanovasel@mail.ru	157
Швецова Наталья Юрьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	shvetsova_ny@pnpi.nrcki.ru	
Шемет Дарья Борисовна	ЮФУ	Shemetdabo@mail.ru	93
Шилова Ольга Алексеевна	ИХС РАН	olgashilova@bk.ru	23
Шишкин Иван Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	shishkin_is@pnpi.nrcki.ru	
Шкорняков Сергей Михайлович	ИК РАН	shkorniyakov@mail.ru	222
Шкуро Владимир Александрович	МИЦ «Интеллектуальные материалы» ЮФУ	vova_qwert@inbox.ru	

Шмайснер Йоханн	ИТЭФ НИЦ КИ	vny007@mail.ru	223
Шмидт Юрий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	shmidt9510@gmail.com	246
Шурыгина Виктория Александровна	СамГУ	ShuryginaNTF@yandex.ru	
Шушунов Михаил Николаевич	НИЦ КИ	viggenin@yandex.ru	53
Юсупов Дибир Магомедович	ИФ ДНЦ РАН	dibir.usupov@mail.ru	158
Якимчук Дмитрий Владимирович	НПЦ НАН Беларуси по материаловедению	young-tech@yandex.by	159
Ямщикова Ксения Степановна	СамГУ	ksya.09.02@mail.ru	160
Янусова Людмила Германовна	ИК РАН	yanusova@crys.ras.ru	224, 247
Яшенкин Андрей Геннадьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ayash@mail.ru	24
Яшина Екатерина Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	yashina_91@inbox.ru	174

Отпечатано в типографии ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт»

188300, Гатчина Ленинградской обл., мкр. Орлова роща, д. 1

Зак. 73, тир. 220, уч.-изд. л. 13,5; 13.02.2017 г.