

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

**LIV Школа ПИЯФ
по физике конденсированного состояния**

ФКС-2020
16–21 марта 2020 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2020

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и список участников LIV Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2020), 16–21 марта 2020 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the LIV PNPI School on condensed state physics (CSP-2020). (16–21 of March, 2020, Saint Petersburg.)

***Организаторы LIV Школы ПИЯФ
по физике конденсированного состояния:***

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

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».

Сборник подготовлен Н. Н. Губановой

Примечание: материалы напечатаны в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции. Клубы любителей	4
Секция «Нейтронное рассеяние»	10
Секция «Рассеяние синхротронного излучения»	41
Секция «Материалы и минералы»	53
Секция «Биофизика и наука о жизни»	146
Секция «Теория физики твердого тела»	161
Секция «Методика моделирования и приборы»	179
Список участников	201

Метод малоуглового рассеяния нейтронов для классификации фрактальных объектов

С. В. Григорьев^{1,2}

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

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Метод малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского (МУРН и МУРР) излучения используют для классификации фрактальных объектов в трехмерном пространстве на масштабах от 1 нм до 10^4 нм. Многочисленные эксперименты с использованием МУРН и МУРР и теория рассеяния нейтронного излучения на фракталах показали, что используя степенной закон интенсивности рассеяния от переданного импульса ($I \propto q^{-\Delta}$), можно различить класс поверхностных фракталов ($3 < \Delta < 4$) от класса объемных фракталов ($2 < \Delta < 3$) [1]. Кроме того, можно обнаружить трехмерные объекты с логарифмической фрактальной подразмерностью – логарифмические фракталы ($\Delta = 3$) [2]. Примерами фрактальных объектов окружающего нас мира служат обычная сажа (объемный фрактал) [1], дерево (логарифмический фрактал) [3], ядро биологической клетки, укладка хроматина в котором характеризуется переходом на шкале размеров от объемного к логарифмическому фракталу, зависящим от типа клетки [4, 5].

В лекции используются материалы курса по малоуглового рассеянию нейтронов, читаемого автором в рамках магистерской программы «Физика конденсированного состояния на установках мега-класса», на физическом факультете Санкт-Петербургского государственного университета.

1. J. Teixeira // J. Appl. Cryst. 21 (1988) 781–785.
2. E.G. Iashina, S.V. Grigoriev // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2017. V. 11. No. 5. P. 897–907.
3. J.O. Indekeu, G. Fleerackers // Physica A. 1998. V. 261. Iss. 3. P. 294–308.
4. E.G. Iashina, E.V. Velichko, M.V. Filatov, W.G. Bouwman, C.P. Duif, A. Brulet, S.V. Grigoriev // Physical Review E 96 (2017) 012411.
5. Е. Г. Яшина, С. В. Григорьев // ЖЭТФ. 2019. Т. 156. Вып. 2 (8). С. 540–544.

Polarized neutrons and magnetism

Arsen Gukasov

Leon Brillouin Laboratory, Saclay, France

The use of magnetism is widespread and can be found in the strategically important industries, such as energy, health, transport and information technology. The comprehension of magnetic structures is crucial for our understanding of how magnetism can couple to the atomic lattice or to charge degrees of freedom. Magnetic neutron diffraction is the leading and unbeaten experimental method to study magnetic structures and provides information that cannot be obtained by any other method. Particularly useful in this respect is the polarized neutron diffraction. In the talk recent experiments, illustrating the current state of the art in the polarized neutron diffraction will be presented.

Компактный источник нейтронов DARIA: текущий статус

П. И. Коник¹, К. А. Павлов^{1,2}, Н. А. Коваленко¹, В. В. Субботина^{1,2},
А. Е. Павлова^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Целью данного проекта является разработка и создание компактного источника нейтронов DARIA (neutron source Dedicated to Applied Research and Industrial Application, нейтронный источник для прикладных исследований и промышленного использования). С практической точки зрения компактный источник характеризуется следующими основными чертами:

- стоимость комплекса будет по крайней мере на два порядка меньше стоимости традиционных источников нейтронов;
- площадь, необходимая для создания комплекса, включая офисные и лабораторные помещения, составляет около 2000 м²;
- сертификация подобного источника сравнительно проста, так как в ходе эксплуатации не используются и не производятся делящиеся материалы.

В сумме эти факторы позволят размещать подобные источники в университетах и небольших исследовательских центрах.

В докладе будет дан обзор текущего состояния проекта, а именно выбранных параметров сильноточного протонного ускорителя, принципиальной схемы мишенной сборки, включающей два холодных замедлителя, а также предполагаемого инструментального парка.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-01074.

Внедрение в нейтронную и синхротронную науку. Как устроена профильная кафедра в СПбГУ?

А. А. Мистонов¹, С. В. Григорьев^{1, 2}

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

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия



Рис. 1. На практике в НИЦ «Курчатовский институт»

Профиль нейтронной и синхротронной физики на кафедре ядерно-физических методов исследования СПбГУ уже шестой год выпускает бакалавров, магистров и аспирантов, специализирующихся на исследованиях в области физики конденсированного состояния с помощью МЕГА-установок.

Особенностью обучения является большое разнообразие форм освоения материала. Обучающиеся не

только слушают лекции, участвуют в семинарах и делают лабораторные, но и проходят практику (рис. 1) в крупнейших российских центрах синхротронных (НИЦ «Курчатовский институт», Москва) и нейтронных (Объединенный институт ядерных исследований, Дубна) исследований. Кроме того, все студенты и аспиранты принимают активное участие в экспериментах (рис. 2) и конференциях (рис. 3), соответствующих теме научного исследования.

Также на кафедре реализуется магистерская программа “Condensed matter physics at MEGA-Science facilities” на английском языке, на которой могут обучаться как российские, так и иностранные студенты.

В докладе речь пойдет о том, как можно поступить на кафедру, как организовано обучение, какие научные направления реализуются, как вообще устроена жизнь на кафедре, и что делать после обучения.

В случае если после доклада появятся вопросы, ответы на них можно найти:

- на сайте кафедры: nsp.phys.spbu.ru,
- по электронной почте:
a.mistonov@spbu.ru (Мистонов Александр Андреевич),
n.a.grigorieva@spbu.ru (Григорьева Наталья Анатольевна),
- в профиле Instagram: [@nsp_phys_spbu](https://www.instagram.com/nsp_phys_spbu).



Рис. 2. Эксперимент по малоугловому рассеянию нейтронов



Рис. 3. Доклад на молодежном форуме Open Science – 2019

Эволюция спиновых систем и динамика мнений

Н. Е. Савицкая

НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Успешное применение физических моделей и методов в других областях знаний значительно расширило горизонты исследований и даже привело в свое время к появлению таких новых наук, как биофизика, геофизика, физическая химия и др. Однако до сих пор специалисты с осторожностью говорят о перспективах симбиоза физики и социальных наук. Это и понятно, ведь на базисном уровне объекты исследования в данных отраслях принципиально различны. Если мы можем охарактеризовать физическую частицу рядом четко определенных, поддающихся измерению и исследованию свойств, то как определить и чем измерить эмоции человека, его мысли и чувства?

Однако есть обширная область исследований, в которой физика и социальные науки имеют точки соприкосновения. Это – изучение коллективного поведения сложных систем, состоящих из большого числа взаимодействующих элементов и кооперативные явления в них. Согласно концепции универсальности, сформулированной изначально в статистической физике, в большинстве случаев коллективное поведение сложных систем не зависит от конкретной природы составляющих из элементов. Например, снежная лавина в горах и волна возбуждения нейронов в мозге могут быть описаны одной и той же моделью.

Это дает надежду на то, что физические модели могут помочь в исследованиях кооперативных социальных явлений, таких как поведение толпы, взаимопроникновение языков и культур, распространение слухов и проч.

На нашей лекции мы рассмотрим простой и наглядный пример применения популярной модели, описывающей эволюцию системы спинов в магнетике – двумерной модели Изинга и ее модификаций – для описания динамики общественного мнения в группе взаимодействующих агентов. На этом примере мы проследим, какие интересные аналогии возникают между физическими величинами и характеристиками группы людей, обобщим физические результаты на социальные явления и сделаем ряд полезных выводов, демонстрирующих возможности и ограничения физических методов в социологии.

Полупроводниковая фотоника: революция света

Г. С. Соколовский

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

Термин «фотоника» в современном понимании возник в конце XX века. Он обобщает и заменяет собой термин «оптика», охватывая, помимо оптики, квантовую электронику, физику лазеров, оптоэлектронику и другие направления науки и техники, связанные с генерацией и распространением потоков фотонов, управлением ими, изучением и использованием их взаимодействия с веществом. Лекция будет посвящена новым бурно развивающимся направлениям полупроводниковой фотоники. Особый акцент будет сделан на «прорывных» направлениях, способных изменить жизнь нашего общества уже в ближайшие годы. Отдельно будут обсуждаться успехи в развитии квантовых каскадных лазеров среднего инфракрасного и терагерцового диапазонов, имеющих широчайший диапазон применений во многих областях науки и техники.

Автор благодарит за поддержку Министерство науки и высшего образования РФ (уникальный идентификатор проекта RFMEFI61619X0111).

Исследования фрагментов средневековой керамики методами нейтронной дифракции, томографии и рамановской спектроскопии

*Б. А. Абдурахимов^{1, 2}, С. Е. Кичанов¹, С. Talmaçhi³, Д. П. Козленко¹,
М. Балашою¹, G. Talmaçhi³, А. В. Руткаускас¹, М. Belc⁴*

¹ *Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка
Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан*

³ *Museum of National History and Archaeology, Constanța, Romania*

⁴ *Ovidius University, Faculty of Applied Sciences and Engineering, Constanța, Romania*

Комплексное изучение фрагментов древней керамики является важнейшей задачей археологии и других гуманитарных наук. Они дают нам возможность получить представление о формировании жизни предков и развитии цивилизации, а также интересные исторические данные, включая приемы в оформлении, этапы развития торговых путей, культурные и социальные изменения и т. д. Неразрушающие нейтронные методы предоставляют ценные структурные данные, такие как фазовая композиция, распределение внутренних скрытых компонентов, наличие трещин и дефектов, а также следы распространения коррозии в древних объектах культурного наследия.

В представленной работе исследованы фрагменты средневековой керамики методами нейтронной дифракции, томографии и рамановской спектроскопии. Керамические фрагменты из Музея национальной истории и археологии Констанцы (Румыния) получены из археологических раскопок в исторической области Добруджа, которая занимает территорию между Дунаем и Черным морем. Исследуемые керамические артефакты датируются IV-VI веками нашей эры римского и византийского периодов.

Фазовый состав исследуемых керамических объектов исследовался методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (г. Дубна, Россия). Пространственное распределение различных фаз в этих объектах исследовались на специализированной экспериментальной станции нейтронной радиографии и томографии на 14-м канале реактора ИБР-2. Эксперименты по спектроскопии комбинационного рассеяния проводились с использованием HR-спектрометра LabRAM с длиной волны возбуждения 633 нм, излучаемой He – Ne-лазером, решеткой 1800, конфокальной дырой 100 мкм и объективом x50.

Представлены результаты по исследованию внутренней структуры, содержания различных фаз, таких как кварц, каолинит, ортоклаз в керамических образцах. Получены трехмерные модели распределения компонентов внутри керамических фрагментов, получены их статистические параметры.

Влияние заряженных частиц на коррозионно-электрохимические свойства железа

*И. К. Аверкиев^{1,2}, О. Р. Бакиева², А. А. Колотов², Ф. З. Гильмутдинов²,
С. М. Решетников^{1,2}, Е. М. Борисова², Т. С. Картапова¹*

¹ *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

² *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

Воздействие потока заряженных частиц на железо и материалы на его основе позволяет получать поверхностные нанослои с особыми структурными состояниями и свойствами, что может быть использовано, например, при работе в агрессивных средах.

Проведена серия экспериментов по радиационному воздействию на поверхность железа ионами кислорода, аргона, азота в импульсно-периодическом режиме. Выполнена работа по радиационному перемешиванию тонкой углеродной пленки с железной матрицей ионами аргона и азота. Воздействие проводилось с энергией первичных ионов 30 кэВ и с дозой облучения 10^{17} ион/см².

Проведены электрохимические исследования полученных объектов, методом снятия анодных потенциодинамических кривых в нейтральных, щелочных и кислых средах. Результаты исследований показали снижение плотности анодных токов как в области условно активного растворения, так и в пассивной области потенциалов для всех типов ионов. Полученные данные позволяют предположить, что пассивное состояние поверхности железа связано не только с традиционно предполагаемыми процессами адсорбции и хемосорбции кислорода, но и с формированием нестехиометрических оксидов железа, образованием в поверхностном слое нитридов, оксинитридов, карбидов, оксикарбидов или оксикарбонитридов железа.

Таким образом, показано, что радиационное воздействие ионами легких химически активных элементов (O^+ , N^+) может улучшать коррозионные свойства поверхности железа в некоторых средах.

Работа выполнена по плану НИР № гос. регистрации АААА-А17-117022250040-0.

Спектры люминесценции в $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

Ш. Н. Алиева¹, Т. Р. Мехдиев¹, О. А. Алиев¹, И. Ф. Юсибова¹, А. В. Агашков²

¹ Институт физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

² Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

В работе для исследований выбраны твердые растворы $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x = 0; 0,25; 0,4; 0,5; 0,6; 0,75; 1$) ферритов, широко применяемых в системах приема, хранения и обработки информации, в качестве радиопоглощающих материалов в интервале частот, включающего гигагерцовый диапазон.

Целью проведенных исследований было установление природы особенностей оптический спектров микropорошков $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ферритов.

Исследованы спектры фотолюминесценции нанопорошков $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ различных составов, соответствующих разному содержанию Zn. Эксперименты проводились при 300 К, для возбуждения люминесценции использовались спектральные линии от ксенонового источника света: 280, 290, 300, 325, 350, 375, 388, 400, 425 нм и также YAG Nd-лазер ($\lambda = 532$ нм). Полученные спектры были интерпретированы в рамках предложенной в [1] модели для Fe_3O_4 , структурного аналога ферритов $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$. В результате были определены и интерпретированы все экспериментально обнаруженные в спектрах люминесценции электронные переходы [2].

1. M.E. Sadat, Masoud Kaveh Baghbador, Andrew W. Dunn, H.P. Wagner, Rodney C. Ewing, Jiaming Zhang, Hong Xu, Giovanni M. Pauletti, David B. Mast, and Donglu Shi. Photoluminescence and photothermal effect of Fe_3O_4 nanoparticles for medical imaging and therapy, Applied Physics Letter, 105, 091903-1-091903-5, 2014.

2. Sh.A. Ahmadova, T.G. Naghiyev, Sh.N. Aliyeva, A.A. Sadigova, T.R. Mehdiyev Photoluminescence properties of $\text{Ni}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanopowders.

Использование формализма групп магнитной суперсимметрии для исследования магнитной структуры Ho_7Rh_3

А. А. Ваулин¹, Н. В. Баранов^{1,2}, Т. Тсутоака³, А. Ф. Губкин^{1,2}

¹ *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

³ *Graduate School of Education, Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, Japan*

Бинарные редкоземельные интерметаллиды R_7Rh_3 привлекают внимание исследователей наличием сложных магнитных фазовых диаграмм, аномального поведения магнитотепловых и магниторезистивных свойств. Однако для данных соединений детальное исследование физических свойств затрудняется отсутствием информации о магнитной структуре. Соединение Ho_7Rh_3 имеет сложную магнитную фазовую диаграмму и демонстрирует набор последовательных магнитных фазовых переходов при $T_N = 32$ К, $T_2 = 23,5$ К и $T_1 = 9$ К [1, 2]. Для исследования несоизмеримой магнитной структуры был использован подход групп магнитной суперсимметрии [3], основанный на математической теории супер-пространства. В данной работе была проведена апробация подхода групп магнитной суперсимметрии и исследование сложной низкотемпературной несоизмеримой магнитной структуры Ho_7Rh_3 .

Нами были проанализированы порошковые нейтронограммы для Ho_7Rh_3 в пара- и антиферромагнитном состояниях при температурах $T = 70, 28$ и $4,5$ К. Было показано, что несоизмеримая магнитная структура может быть хорошо описана группой магнитной суперсимметрии $P6_31'(00g)hs$ с волновым вектором $\mathbf{k} = [0, 0, 0.38]$. Было установлено, что магнитные моменты атомов Ho, занимающих позиции $2b$, образуют простую спираль. Магнитные моменты атомов Ho, занимающих две неэквивалентные позиции $6c$, образуют поперечные спиновые волны и распространяются вдоль оси c .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 18-72-10022.

1. T. Tsutaoka *et al.*, Physica B 327 (2003) 352-356.
2. T. Tsutaoka *et al.*, Journal of Alloys and Compounds 654 (2016) 126–132.
3. A. Janner, T. Janssen, Acta Cryst A36 (1980) 399–408.

Исследование остаточных напряжений в тонкой стальной ленте-подложке для ВТСП-проводов 2-го поколения методом дифракции нейтронов

И. Д. Карпов, С. А. Рылов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) 2-го поколения представляют собой сложные многослойные системы, в которых сверхпроводящая керамика толщиной 1–3 мкм через серию буферных слоёв наносится на металлическую ленту-подложку. Качество несущей ленты оказывает сильное влияние на качество всего ВТСП-провода. Несмотря на предварительную обработку и полировку, в ленте могут сохраняться внутренние механические напряжения, внесённые при прокатке в процессе её изготовления. Внутренние напряжения могут существенно ухудшить эксплуатационные характеристики изделия и могут стать причиной его разрушения.

В данной работе исследовалась лента из стали AISI 316S шириной 4 мм и толщиной 100 мкм, применяющаяся при производстве ВТСП-проводов 2-го поколения в НИЦ «Курчатовский институт». Исследования проводились на нейтронном дифрактометре СТРЕСС, базирующемся на исследовательском реакторе ИР-8.

При измерениях необходимо, чтобы объём, рассеивающий нейтроны, полностью находился внутри образца, т. к. его неполное погружение вызывает сдвиг положения дифракционных пиков. Поэтому исследуемая лента была разрезана на сегменты по 4 см и сложена в «пакет» из 10 слоёв с сохранением ориентации относительно направления прокатки ленты, что позволило увеличить толщину образца до 1 мм и использовать в эксперименте пучок нейтронов шириной 0,5 мм. Сборка была зафиксирована в алюминиевом корпусе и измерения проводились непосредственно сквозь него, т. к. дифракционные пики от аустенитной стали и алюминия не перекрываются в рабочей области.

Полученные результаты свидетельствуют о наличии распределения остаточных напряжений в исследуемой стальной ленте.

Данная работа выполнена на оборудовании УНУ НИК ИР-8. Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 22.08.2019 № 1886 и приказ от 23.09.2019 № 2143).

Структурные исследования цементных материалов для хранения радиоактивного графита методом нейтронной томографии

*М. Р. Кенесарин^{1,2}, С. Е. Кичанов¹, И. Ю. Зель¹, М. Балашою^{1,3}, Д. П. Козленко¹,
М. Nicu³, L. Ionascu³, A.C. Dragolici³, F. Dragolici^{3,4}*

¹ *Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка
Объединенного института ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия*

³ *Horia Hulubei National Institute of Physics and Nuclear Engineering,
Bucharest–Magurele, Romania*

⁴ *International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria*

Цементные материалы являются ключевыми строительными элементами при постройке специальных объектов для хранения радиоактивных отходов различного типа. К этим строительным материалам предъявляются достаточно жесткие критерии и требования по механическим и физико-химическим свойствам. В частности, для обеспечения конструкционной стабильности на протяжении порядка сотни лет, цементные материалы должны обладать коррозионной и радионуклидной стойкостью. Особенно остро эта проблема стоит для цементных материалов для долгосрочного захоронения или утилизации графита.

В данной работе была исследована внутренняя структура нескольких цементных материалов, перспективных для хранения радиоактивного графита, с помощью метода нейтронной томографии.

Эксперимент по нейтронной томографии проводился на установке НРТ на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2.

Специфика взаимодействия нейтронов с различными компонентами изучаемых фрагментов различных цементов и применение современных математических алгоритмов для анализа данных позволили получить пространственное распределение графита в объеме образцов, а также определить морфологические особенности графитовых включений. На основе проведенного структурного анализа обсуждается применение исследованных цементов для хранения радиоактивного графита.

Комбинирование нейтронной и рентгеновской рефлектометрии для исследования тонких пленок Ti

В. А. Матвеев, Н. К. Плешанов

НИИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Нейтронная и рентгеновская рефлектометрия являются неразрушающими методами, позволяющими получать информацию о толщине и шероховатости тонких пленок. Оба метода исследования основаны на отражении волн от границ раздела, при этом коэффициент отражения определяется разностью оптических потенциалов.

В работе представлены результаты исследования тонких пленок Ti с помощью комбинирования рефлектометрии рентгеновского и нейтронного излучения. Благодаря малому поглощению, нейтроны позволяют получать информацию со всей толщины образца. В тоже время высокая интенсивность рентгеновского излучения позволяет изучать тонкие пленки с большим разрешением и получать дополнительную информацию о состоянии их поверхности. Результаты исследований позволили установить характер кинетики окисления тонких пленок Ti на воздухе и уточнить особенности строения оксидного слоя. Было установлено, что кинетика окисления описывается логарифмическим законом [1], а увеличение температуры значительно ускоряет процесс окисления. Полученные результаты указывают на применимость приближений модели Кабрера–Мотта [2] для описания процесса окисления нанослоев Ti на воздухе.

1. V. Matveev, N. Pleshanov, J. of Neutron Research. 20, 5 (2018).
2. N. Cabrera, N.F. Mott. Rep. Prog. Phys. 12 (1949).

Особенности магнетизма в $\text{Dy}_{1-x}\text{Ho}_x\text{MnO}_3$

A. H. Матвеева¹, И. А. Зобкало¹, M. Meven², A. Sazonov², V. Hutanu²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² RWTH Aachen University, Garching, Germany

В последнее время интерес к соединениям, в которых электрическая поляризация возникает вследствие магнитного упорядочения – «несобственным» мультиферроикам (или мультиферроикам II рода), многократно возрос в связи с их необычными магнитоэлектрическими свойствами. К представителям «несобственных» мультиферроиков относятся соединения из семейства $R\text{MnO}_3$ (где $R = \text{Ho}, \text{Dy}$). Обнаруженные в исследуемых системах существенные магнитоэлектрические взаимодействия создают предпосылки не только для эффективного влияния магнитного поля на фазовые переходы, но и предоставляют возможность магнитного контроля за эффектами электрической поляризации. Сильное магнитоэлектрическое взаимодействие в перовскитных оксидах марганца $R\text{MnO}_3$ приводит к появлению сегнетоэлектрической поляризации, индуцированной специфическим типом магнитного упорядочения. В DyMnO_3 сегнетоэлектрическое упорядочение порождается циклоидальной спиновой структурой марганцевой подсистемы, что удовлетворительно описывается в рамках обратной модели Дзялошинского – Мория [1]. В HoMnO_3 механизм происхождения сегнетоэлектрической поляризации – другой, он обусловлен симметричным обменом ионов марганца [2].

С целью изучения связи между редкоземельной и марганцевой магнитными подсистемами и последовательного изучения влияния типа редкоземельных ионов на магнитный порядок в мультиферроиках $\text{Dy}_{1-x}\text{Ho}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0,2$) были проведены эксперименты по дифракции нейтронов, в том числе, с использованием поляризованных нейтронов.

Измерения выполнены на дифрактометрах HEIDI и POLI в MLZ (Гархинг, Германия). Температурные зависимости магнитных параметров обоих исследованных соединений демонстрируют значительную зависимость от режима измерений (нагрев/охлаждение), что можно интерпретировать как очень нетривиальный температурный гистерезис, обусловленный взаимодействием двух магнитных систем – марганцевой и редкоземельной. Однако вид этого гистерезиса различается для DyMnO_3 и $\text{Dy}_{0,8}\text{Ho}_{0,2}\text{MnO}_3$, что более ярко свидетельствует о сильном влиянии редкоземельной магнитной подсистемы на марганцевую в «родительском» соединении, чем в замещенном $\text{Dy}_{0,8}\text{Ho}_{0,2}\text{MnO}_3$. Наблюдается релаксация магнитной структуры в DyMnO_3 .

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-52-12047.

1. Sergienko I.A., Dagotto E. Phys. Rev. B 73 (2006) 094434.
2. Sergienko I.A., Sen C., Dagotto E. Phys. Rev. Lett. 97, 227204 (2006).

Визуализация дифракционного контраста между ферритной и мартенситной сталью методом нейтронной радиографии

М. М. Мурашев, В. П. Глазков, В. Т. Эм

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Метод нейтронной радиографии с использованием монохроматического нейтронного излучения позволяет визуализировать дифракционный контраст между различными фазами в поликристалле исходя из ослабления интенсивности нейтронного пучка, прошедшего сквозь образец, в следствии когерентного рассеивания. Хотя этот метод уже зарекомендовал себя в исследованиях распределения фаз в стали, в литературе приводится информация лишь о сильно отличающихся по структуре фазах таких как феррит и аустенит, аустенит и мартенсит, аустенит и бейнит.

Поэтому целью данной работы являлась визуализация дифракционного контраста между образцами ферритной и мартенситной стали с близкими кристаллическими структурами методом нейтронной радиографии с использованием монохроматического нейтронного излучения.

Нами был изготовлен тестовый образец, состоящий из двух одинаковых скрепленных между собой стальных пластинок из углеродистой стали У12, после различной термообработки. Первая пластинка после термообработки имела ОЦК структуру феррита (параметр решетки $a=2.86 \text{ \AA}$), а вторая – ОЦТ структуру мартенсита (параметр решетки $a=2.83 \text{ \AA}$ и $c=3.08 \text{ \AA}$).

В ходе эксперимента нами были получены радиографические изображения тестового образца при разных длинах волн нейтронного излучения. На изображении, полученном при длине волны 4.1 \AA , видна разница в ослаблении интенсивности нейтронного пучка между пластинками, не наблюдаемая при других длинах волн. Это связано с тем, что длина волны 4.1 \AA находится в интервале между двумя брэгговскими скачками: для мартенсита 4.17 \AA соответствующей плоскости (101), для феррита 4.05 \AA соответствующей плоскости (110), что позволяет сделать вывод о возможности визуализации дифракционного контраста между мартенситной и ферритной фазой стали, имеющих очень близкую структуру.

Использование данного неразрушающего метода визуализации может помочь в решении задач, связанных с технологиями термообработки поверхности ответственных изделий из углеродистых сталей.

Данная работа выполнена на оборудовании УНУ НИК ИР-8. Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 22.08.2019 № 1886 и приказ от 23.09.2019 № 2143).

Магнитная динамика в $R\text{FeO}_3$ ($R = \text{Ho}, \text{Tb}$) при высоких энергиях

А. К. Овсяников^{1,2}, И. А. Зобкало¹, V. Hutani², W. Schmidt³

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Institute of Crystallography RWTH Aachen University, Aachen, Germany

³ Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany

Магнитные свойства редкоземельных ортоферритов $R\text{FeO}_3$ обусловлены сложными взаимодействиями между моментами 3d-электронов переходного металла и 4f-электронов редкоземельных элементов. Роль взаимодействий Fe – R или R – R возрастает с понижением температуры, что приводит к спин-ориентационным переходам [1]. Антисимметричное взаимодействие Дзялошинского – Мория (ДМ) обеспечивает слабую ферромагнитную составляющую. Предполагается, что магнитные взаимодействия в $R\text{FeO}_3$ и, по-видимому, ДМ являются источником сегнетоэлектрической поляризации. В $R\text{FeO}_3$ железная подсистема упорядочивается при температурах около $T_N = 650$ К, имеет слабый ферромагнитный порядок и описывается магнитным представлением Γ_4 [2]. При понижении температуры наблюдается несколько спин-ориентационных переходов. При $T_{\text{sr1}} = 50\text{--}60$ К из магнитной фазы Γ_4 в фазу Γ_1 и при $T_{\text{sr1}} = 10\text{--}30$ К переход из фазы Γ_1 в фазу Γ_2 [3].

В данной работе представлены результаты экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов на ортоферритах гольмия HoFeO_3 и тербия TbFeO_3 , которые были выполнены на спектрометрах IN20 и PUMA. Для описания магнитных возбуждений в $R\text{FeO}_3$ использовался стандартный спин-волновой подход. Получены параметры обменного взаимодействия, которые показывают, что основной вклад в формирование магнитной структуры вносит суперобмен внутри подсистемы Fe^{3+} . При этом тип редкоземельного иона практически не оказывает влияние на максимум энергии дисперсионных кривых, которые соответствуют Fe^{3+} подсистеме. Однако, обмен R – Fe приводит к обменному расщеплению основного состояния редкоземельного иона [4, 5], а его конкуренция с R – R- обменом является причиной температурной зависимости энергии анизотропии и величины энергетической щели в железной подсистеме.

1. J.-H. Lee *et al.*, Phys. Rev. Lett. 107, 117201 (2011); C.-Y. Kuo *et al.*, Phys. Rev. Lett. 113, 217203 (2014).
2. W.C. Koehler, E.O. Wollan, and M.K. Wilkinson, Phys. Rev. 118, 58 (1960).
3. T. Chatterji, M. Meven, and P.J. Brown, AIP Advances 7, 045106 (2017).
4. J.C. Walling, R.L. White. Phys. Rev. B 10, 4737 (1974).
5. R.M. White, R.J. Nemanich, C. Herring. Phys. Rev. B 25, 1822 (1982).

Наноразмерная морфометрия ферромагнитных частиц на поверхности магниторезистивных структур

Е. Озивская^{1,2}, О. Коплак¹

¹ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

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

Магниторезистивные структуры на основе ферромагнитных слоёв, разделённых тонким немагнитным слоем, находят широкое практическое применение не только в качестве элементов хранения информации, но и как высокочувствительные биосенсоры, датчики магнитомеченных биологических объектов. [1, 2]. При этом актуальной физической задачей становится взаимодействие полей рассеяния от ферромагнитных частиц на поверхности таких структур. В ходе работы изучалась чувствительность магниторезистивных платформ к наличию наночастиц Fe_2O_3 путем установления закономерностей локального перемагничивания сенсоров под действием их полей рассеивания. В частности, наблюдение топологического и магнитного рельефов поверхности сенсоров с наночастицами с помощью атомно-силовой (АСМ) и магнитосиловой микроскопии (МСМ) (рис.). В качестве магниторезистивной платформы были использованы гетероструктуры следующего состава (Ta/PyCr/CoFeNi/Cu(t)/CoFeNi/Ru/CoFeNi/FeMn/Ta), которые различались толщиной слоя меди Cu(t), где $t = 20, 22$ и 24 ангстрема.

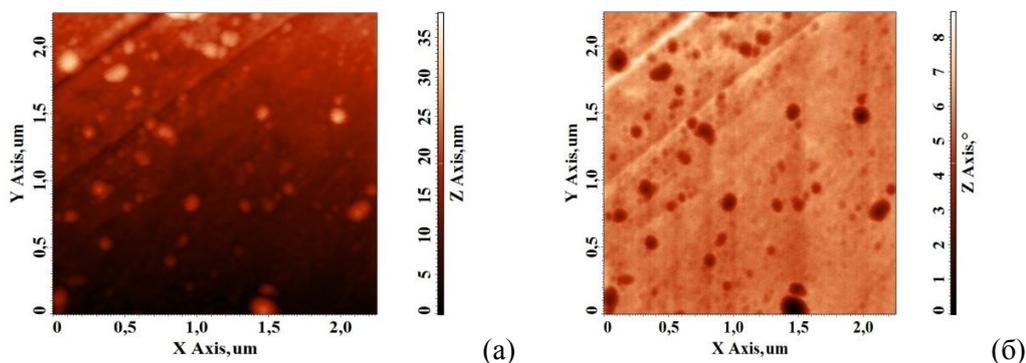


Рис. 2D-изображение поверхности гетероструктуры с нанесенными частицами на поверхности в режиме АСМ (а) и МСМ (б)

Установлена зависимость магнитного контраста от диаметра частиц. Оценен вклад локального перемагничивания наночастицами поверхностного слоя в интегральное изменение магнитного момента магниторезистивной платформы. Определены оптимальные параметры чувствительности магниторезистивных структур в зависимости от толщины слоя меди.

1. О. Коплак *et al.*, JMMM, 433, 91–97 (2017).
2. О. Коплак *et al.*, Superlattices and Microstructures, 121, 23–32 (2018).

Измерение спин-волновой жесткости в аморфных ферромагнетиках с учетом энергетической щели

К. А. Пшеничный^{1, 2}, Л. А. Азарова^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Во второй половине XX века в Ленинградском Институте Ядерной Физики был разработан способ измерения жесткости спиновых волн в ферромагнетиках с помощью выделения неупругой составляющей малоуглового рассеяния нейтронов. Этот способ был назван «методом наклонной геометрии», в котором магнитное поле и поляризация нейтронов направлены под углом в 45 градусов к падающему пучку, что обеспечивает ненулевую величину неупругого рассеяния нейтронов на магнонах. Это рассеяние имеет четкую границу θ_C (угол отсечки), которая зависит от приложенного магнитного поля. Зная величину магнитного поля и «угол отсечки» θ_C можно получить значение константы спин-волновой жесткости. Однако для некоторых типов ферромагнетиков (в частности аморфных) дисперсионное соотношение спиновых волн содержит щель в спектре и выглядит как $\hbar\omega = Aq^2 + (g\mu_B H + \Delta E_g)$, где H – приложенное магнитное поле, A – константа спин-волновой жесткости, q – волновой вектор, а ΔE_g – энергетическая щель. Эту щель можно обнаружить при обработке экспериментальных результатов малоуглового рассеяния.

В докладе представлены результаты измерения спин-волновой жесткости ферромагнитного микропровода, представляющего собой аморфную жилу соединения $\text{Fe}_{77,5}\text{Si}_{5,5}\text{B}_{15}$ диаметром 10 мкм в стеклянной оболочке [1]. Исследования проводились методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов. В соответствии с квадратичным законом дисперсии для ферромагнетика, рассеяние нейтронов на спиновых волнах сконцентрировано внутри конуса с углом отсечки θ_C . Угол отсечки θ_C был получен сравнением антисимметричного вклада в интенсивность рассеяния поляризованных нейтронов с модельной функцией для магнитного поля, которое изменялось от 3,40 мТ до 41 мТ. При этом угол отсечки θ_C уменьшался в соответствии с уравнением $\theta_C^2(H) = \theta_0^2 - (g\mu_B H + \Delta E_g)\theta_0/E_i$, где $\theta_0 = \hbar^2/2Am_n$. Жесткость спиновых волн A и щель в спектре спиновых волн ΔE_g были получены из полевой зависимости $\theta_C^2(H)$. Величина жесткости спиновых волн ферромагнитного микропровода $\text{Fe}_{77,5}\text{Si}_{5,5}\text{B}_{15}$ при комнатной температуре равна $A = 82(3)$ мэВ, а энергетическая щель $\Delta E_g = 0,048(2)$ мэВ.

1. С. В. Григорьев, К. А. Пшеничный, И. А. Барабан, В. В. Родионова, К. А. Чичай, А. Хайнеманн, Письма в ЖЭТФ, том 110, вып. 12, с. 800–806 (2019).

Нейтронно-дифракционные исследования остаточных напряжений в тонкостенных металлических образцах, изготовленных методом прямого лазерного выращивания

С. А. Рылов, И. Д. Карпов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Прямое лазерное выращивание является современной технологией аддитивного производства металлических изделий. В данном методе послойное выращивание изделия происходит путём подачи металлического порошка непосредственно в область воздействия луча лазера. Из-за больших градиентов температур при производстве, в изделиях формируются значительные остаточные напряжения, снижающие качество детали и способные вызвать её разрушение. Целью данной работы было проведение сравнения картин распределения остаточных напряжений в двух модельных образцах, имеющих одинаковые формы и размеры, но изготовленных из разных по свойствам сплавов. Образцы представляли собой пластинки длиной 70 мм, высотой 30 мм, толщиной 2,2 мм из стали AISI 410 и никель-хромового сплава Inconel 625, выращенные на жёсткой подложке.

Исследования проводились на дифрактометре СТРЕСС в НИЦ «Курчатовский институт». Были измерены напряжения вдоль трёх экспериментальных линий: вдоль длины вблизи подложки, вдоль высоты в центре образца и вдоль высоты у края пластинок. Малая толщина образцов позволила провести расчёты в приближении плосконапряжённого состояния.

В результате проведённых экспериментов было установлено, что, несмотря на численную разницу в величинах остаточных напряжений, картины их распределения в разных образцах имеют одинаковый характер.

Данная работа выполнена на оборудовании УНУ НИК ИР-8. Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ от 22.08.2019 № 1886 и приказ от 23.09.2019 № 2143).

Кристаллическая структура и магнитные свойства $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$

М. А. Сёмкин¹, А. Хосер², Н. В. Урусова³, А. Н. Пирогов¹

¹ Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, Берлин, Германия

³ Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

На порошковом дифрактометре высокого разрешения E9 FIREPOD (Берлин, Германия) получены нейтронограммы соединения $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$ в диапазоне температур от 7 до 21 К. Нейтронограммы соединения $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$ хорошо описываются, в рамках орторомбической структуры оливина (пространственная группа $Pnma$). Ионы Li занимают позиции 4a с координатами (0, 0, 0), ионы (Ni, Co) занимают позиции 4c с координатами (x, 0,25, z), ионы P находятся в узлах 4c (x, 0,25, z), а ионы O расположены в узлах 4c (x, 0,25, z) и 8d (x, y, z).

С помощью программы BasIreps в пакете FullProf получен перечень возможных магнитных структур с волновым вектором $\mathbf{k} = 0$ для соединения $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$. Проведен анализ базисных функций восьми неприводимых представлений (НП). Наилучшее ($\chi^2 = 1,94\%$) описание нейтронограмм $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$ достигается для (базисной функции Irep(6) НП) – антиферромагнитного упорядочения вдоль оси c ионов (Ni,Co), 1: (0,2753; 0,2500; 0,9828) и (Ni, Co), 4: (0,7753; 0,2500; 0,5172) с ионами (Ni, Co), 2: (0,2247; 0,7500; 0,4828) и (Ni, Co), 3: (0,7247; 0,7500; 0,0172). На рисунке показана экспериментальная и расчетная нейтронограммы $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$ при 7 К и уточненные параметры кристаллической и магнитной структур. Величина магнитного момента ионов (Ni, Co) при 7 К составляет 1,99(5) μ_B .

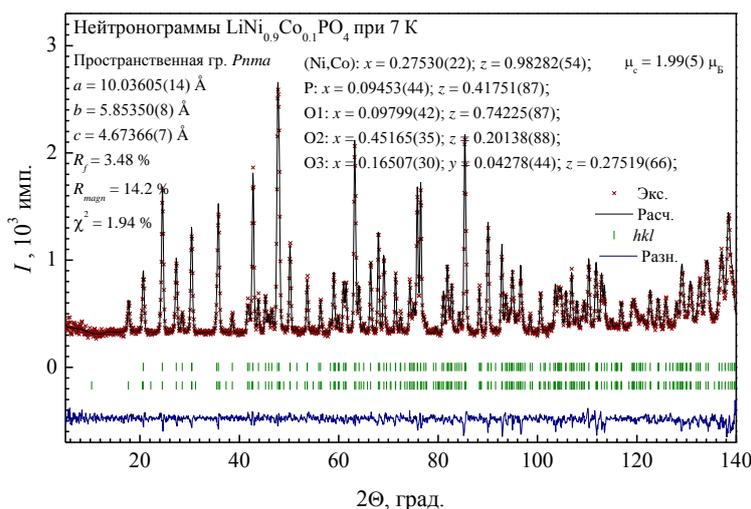


Рис. Нейтронограммы $\text{LiNi}_{0,9}\text{Co}_{0,1}\text{PO}_4$ при 7 К

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-60011.

Эпитепловой дифрактометр для компактного импульсного нейтронного источника: научное обоснование, концепция и расчеты

Д. А. Серебренников¹, Е. С. Клементьев^{1,2}, Ю. Б. Кудасов^{3,4}, П. И. Коник⁵

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

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

³ *Саровский физико-технический институт НИЯУ МИФИ, Саров, Россия*

⁴ *Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия*

⁵ *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

Нейтронная дифракция традиционно считается одной из ключевых методик исследования в области физики конденсированного состояния. По сравнению с рентгеновской дифракцией, нейтронная дифракция имеет ряд известных преимуществ, связанных с нелинейной зависимостью коэффициента поглощения от порядкового номера элемента в Периодической таблице, а также наличием спина у нейтрона. Большинство современных дифрактометров работает в диапазоне холодных и тепловых нейтронов с энергиями 3–80 мэВ (длина волны примерно 1–5 Å), что позволяет решать типичные для физики конденсированного состояния задачи. Однако переход в область эпитепловых нейтронов предоставляет ряд дополнительных уникальных возможностей, а именно измерения в высоких магнитных полях (от 30 до 50+ Тесла) и измерения образцов с сильным поглощением тепловых нейтронов (вплоть до «непрозрачных» объектов на основе В, Cd, Gd, Eu, Sm).

В данной работе развивается концепция времяпролетного эпитеплого дифрактометра для компактного импульсного источника нейтронов. Приводится обзор существующих аналогов, расчет основных параметров дифрактометра, таких как: диапазон углов, энергий/длин волн, доступных межплоскостных расстояний, характерного временного окна измерения. Сделаны оценки разрешения и корреляции между длительностью импульса магнитного поля и оптимальным энергетическим окном.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-12-00363 «Разработка и прототипирование нейтронных станций для компактных источников нейтронов».

Влияние давления на формирование скирмионной решетки в $Mn_{1-x}Fe_xGe$

*Д. О. Сканченко^{1,2}, Е. В. Алтынбаев^{1,2}, N. Martin³,
Р. А. Садыков^{2,4,5}, А. В. Цвященко², С. В. Григорьев^{1,2,6}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

³ Leon Brillouin Laboratory, SEA Saclay, France

⁴ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

⁵ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия

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

Соединения $Mn_{1-x}Fe_xGe$, синтезированные при высоком давлении, кристаллизуются в нецентросимметричную кубическую структуру типа B20 [1], в которой отсутствие центра инверсии в расположении магнитных атомов приводит к возникновению антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского – Мория (ДМ) и образованию магнитной спирали [2, 3]. Анализ эволюции магнитной структуры $MnSi$ и $FeGe$ во внешнем магнитном поле позволил обнаружить образование скирмионной решетки (СКР) или А-фазы [4, 5]. В работе [6] показано, что ни температурный, ни полевой диапазоны области существования А-фазы в соединении $MnSi$ практически не зависят от внешнего давления вплоть до $P = 13$ кбар. При этом температура магнитного упорядочения в этом соединении существенно падает. Известно, что в соединениях $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0,1$ и $0,3$ А-фаза наблюдается в широком диапазоне температур, $30 \text{ К} < T < 130 \text{ К}$, и полей, $0,8 \text{ Тл} < H < 2 \text{ Тл}$ [7]. Данное исследование посвящено исследованию магнитной структуры $Mn_{1-x}Fe_xGe$ с $x = 0,1$ и $0,3$ под действием квазигидростатического давления до 10 кбар методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Оказалось, что давление приводит к одновременному увеличению всех критических полей: H_{c1} , H_{c1m} , H_{c2} – при низких температурах и уменьшению температуры магнитного упорядочения, T_c , как для соединений с $x = 0,1$, так и для соединений с $x = 0,3$. Также обнаружено, что в случае соединения $Mn_{0,7}Fe_{0,3}Ge$ увеличение внешнего давления приводит к уменьшению как температурного, так и полевого диапазонов существования А-фазы. Сравнение эволюции фазовой диаграммы «поле – температура» для соединений $Mn_{1-x}Fe_xGe$ и $MnSi$ позволяет подтвердить различную природу основных взаимодействий, формирующих длиннопериодную магнитную структуру в этих соединениях.

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (грант № 17 12 01050).

1. A.V. Tsvyashchenko, J. Less-Common Met. 99, L9 (1984).
2. I.E. Dzyaloshinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46 1420 (1964).
3. P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C13L881 (1980).
4. Н. М. Чубова и др., ЖЭТФ. Т 152. №5. С. 933-943 (2017).
5. H. Wilhelm *et al.*, Phys. Rev. Lett. Vol. 107. P. 127203 (2011).
6. L.J. Bannenberg *et al.*, Phys. Rev. B 100, 054447 (2019).
7. E.V. Altynabev *et al.*, arXiv:1911.12190 [cond-mat.str-el].

Магнетизм низкоразмерного фрустрированного соединения $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$

А. Е. Сулопарова, А. И. Курбаков

НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Исследуемое соединение $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$ принадлежит новому структурному низкоразмерному семейству теллуридов A_2MnTeO_6 (А – одновалентный металл). Такие системы, находящиеся вплоть до самых низких температур в неупорядоченном состоянии, подобному спиновой жидкости, перспективны для проявления новых квантовых явлений. В частности, магнитная восприимчивость $\chi(T)$ соединения демонстрирует очень необычное поведение: она описывается законом Кюри-Вейсса при высокой температуре с $\Theta_W = -51$ К и при этом не проявляет явных аномалий, указывающих на дальнейшее магнитное упорядочение в слабом магнитном поле [1].

В результате нейтронной дифракции при 300 К проведено уточнение кристаллической структуры. Катионы Mn^{4+} и Te^{6+} образуют слои, которые чередуются с немагнитными слоями, состоящими из Li^+ катионов. В магнитоактивном слое формируются треугольники из ионов Mn. Благодаря такой магнитной сверхструктуре в системе при организации АФМ обмена становится возможной реализация фрустрированного магнетизма.

Для определения магнитной структуры в упорядоченном состоянии были проведены нейтронные измерения на порошковом дифрактометре HRPT, PSI при $T = 1.6$ К и исследования в диапазоне температур выше и ниже $T_N = 9$ К на DMC, PSI для анализа температурного изменения магнитного упорядочения подсистемы ионов Mn. В результате, на низкотемпературных нейтронограммах

было обнаружено появление дополнительных брэгговских отражений, связанных с формированием дальнего АФМ порядка при $T < 9$ К.

Использование симметричного анализа по положению наиболее интенсивных магнитных рефлексов совместно с методом полнопрофильного анализа по Ритвельду позволило установить характер магнитного упорядочения ниже T_N , схема которого представлена на рисунке. Магнитная структура $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$ соразмерная, описывается вектором распространения $\mathbf{k} = (1/3, 1/3, 0)$, а магнитные ионы

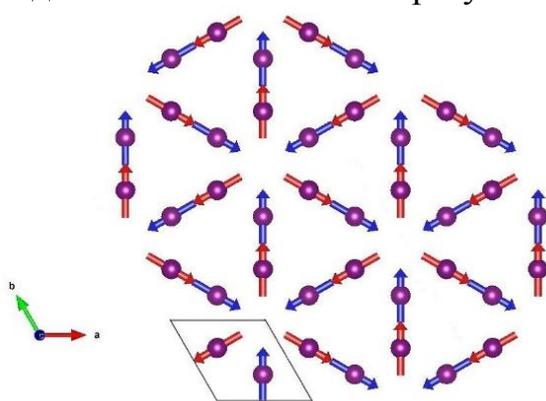


Рис. Магнитная структура $\text{Li}_2\text{MnTeO}_6$.

Стрелки показывают магнитный момент ионов Mn с $z = 0.25$ (синие) и с $z = 0.75$ (красные)

марганца образуют 120° треугольную структуру. В результате в системе реализуется слабый супер-суперобмен Mn – O – Li/Te – O – Mn.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 18-12-00375.

1. V.B. Nalbandyan, I.L. Shukaev *et al.* Inorg. Chem., 58, 5524–5532 (2019).

Применение метода спектрометрии Резерфордовского обратного рассеяния ионов в порошковых нанотехнологиях

*А. А. Татаринова^{1,2}, А. С. Дорошкевич^{1,3}, А. И. Любчик⁴, М. Кулик^{1,5},
В. И. Бондарчук¹, М. Балашою^{1,6}*

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия*

² *Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАНУ, Киев, Украина*

⁴ *i3N/CENIMAT, Department of Materials Science, Faculty of Science and Technology,
New University of Lisbon and CEMOP/UNINOVA, Campus de Caparica, Caparica, Portugal*

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

⁶ *Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear Engineering (IFIN-HH),
Bucharest, Romania*

Спектрометрия обратного рассеяния Резерфорда (Rutherford Backscattering Spectrometry, RBS) – это метод рассеяния ионов, используемый для анализа композиционных тонких пленок толщиной менее 1 мкм. Во время анализа RBS на образец направляют высокоэнергетические ионы He^{2+} с энергиями в области от нескольких сотен килоэлектронвольт до 2–3 МэВ и измеряют распределение энергии и выход обратно рассеянных ионов He^{2+} под заданным углом. Поскольку известно поперечное сечение обратного рассеяния для каждого элемента, можно получить количественный профиль глубины композиции из полученного спектра RBS.

Использование данного метода позволяет получать информацию о химическом составе и кристалличности образца как функции расстояния от поверхности образца (глубины), а также о структуре поверхности монокристаллического образца.

На основе рассмотренных методов исследования элементного состава и структуры твердых тел, основанных на Резерфордовском обратном рассеянии быстрых заряженных частиц, было произведено исследование образцов, состоящих из монодисперсных наноразмерных (7,5 нм) частиц твердого раствора системы ZrO_2 –3мол% Y_2O_3 (YSZ) в матрице полимера ПВС [1].

1. Chemical-Electric Energy Conversion Effect in Zirconia Nanopowder Systems A.S. Doroshkevich, A.I. Lyubchik, A.V. Shilo, T.Yu. Zelenyak, V.A. Glazunovae, V.V. Burhovetskiy, A.V. Saprykina, Kh.T. Holmurodov, I.K. Nosolev, V.S. Doroshkevich, G.K. Volkova, T.E. Konstantinova, V.I. Bodnarchuk, P.P. Gladyshev, V.A. Turchenko, S.A. Sinyakina. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2017. Vol. 11. No. 3. Pp. 523–529.

DOI: 10.1134/S1027451017030053.

Корреляция магнитных фаз и кристаллической структуры в редкоземельных ортоферритах

О. В. Усманов¹, И. А. Зобкало¹, А. К. Овсяников^{1, 2}, V. Hutani²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Institute of Crystallography RWTH Aachen University, Aachen, Germany

Замечательные магнитные свойства редкоземельных ортоферритов $R\text{FeO}_3$ обусловлены сложными взаимодействиями между моментами $3d$ -электронов на переходном металле и $4f$ -электронов на редкоземельных атомах. В исследованиях [1, 2] показано, что эти соединения имеют довольно высокие температуры Нееля $T_N \approx 600 - 700$ К, ниже которых моменты Fe упорядочены антиферромагнитно со слабым ферромагнитным компонентом. С понижением температуры Fe– R возрастает роль взаимодействия, что приводит к спин-переориентационный (SR) переходу, чаще всего в диапазоне $T_{SR} \approx 50 - 60$ К. Редкоземельная подсистема с относительно слабыми взаимодействиями R – R остается парамагнитной при высоких температурах или слабо поляризована молекулярным полем упорядоченных ионов Fe. Спонтанное упорядочение редкоземельной подрешетки происходит ниже $T_{NR} \approx 5 - 10$ К. Сложные магнитные свойства системы возникают из-за множественности различных обменных взаимодействий. Помимо симметричного обменного взаимодействия гейзенберговского типа Fe–Fe, Fe– R и R – R , взаимодействие Дзялошинского – Мория (ДМ) [3, 4] оказывает существенное влияние на магнитные свойства и приводит к слабому ферромагнетизму этих соединений.

Есть основания считать, что взаимодействие ДМ может быть причиной возникновения сегнетоэлектрического упорядочения в DyFeO_3 , YFeO_3 и LuFeO_3 , обнаруженного при температурах выше T_{SR} [5]. Следует также отметить, что орторомбическая пространственная группа $Pbnm$ (или $Pnma$), которой описывается кристаллическая структура $R\text{FeO}_3$, является центросимметричной и не допускает спонтанную электрическую поляризацию. Поэтому для поиска искажений, вызывающих понижение симметрии, необходимы более точные исследования кристаллических и магнитных свойств соединений $R\text{FeO}_3$.

С целью выяснения микроскопических механизмов, приводящих к мультиферроичности в рассматриваемых системах, была исследована температурная эволюция кристаллической структуры $R\text{FeO}_3$ ($R = \text{Ho}, \text{Tm}, \text{Lu}$) на рентгеновском дифрактометре Rigaku SmartLab методом порошковой дифракции. Значения температур измерений выбирались таким образом, чтобы соответствовать различным магнитным фазам соответствующего соединения. Для каждой температуры вычислены параметры обменных связей – длины и углы. Эволюция параметров обменных связей в TmFeO_3 демонстрирует, что углы и длины связей в плоскости ab (Fe– O_{II} –Fe) остаются примерно одинаковыми во всех магнитных фазах, тогда как эти параметры связи вдоль оси c (Fe– O_I –Fe) заметно меняются при понижении температуры до 85 К,

соответствующей температуре ориентационного перехода. Можно предположить, что это магнитострикционное явление связано с изменением соотношения обменного взаимодействия Fe-Fe и Fe-R подсистем. В то же время длины и углы связи Fe–O_I–Fe и Fe–O_{II}–Fe в HoFeO₃ остаются одинаковыми (в пределах погрешности) для всех магнитных фаз – Γ_4 , Γ_1 , Γ_2 . В LuFeO₃ магнитное упорядочение во всем интервале температур ниже $T_N = 625$ К характеризуется представлением Γ_4 , и определенные нами параметры обменных связей также остаются неизменными.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-52-12047.

1. M. Marezio, J.P. Remeika, and P.D. Dernier, Acta Cryst. B 26 (1970) 2008.
2. W.C. Koehler, E.O. Wollan, and M.K. Wilkinson, Phys. Rev. 118 (1960) 58.
3. I.E. Dzyaloshinsky, J. Phys. Chem. Solids 4 (1958) 241.
4. T. Moriya, Phys. Rev. 120 (1960) 91.
5. U. Chowdhury *et al.* Appl. Phys. Lett. 105 (2014) 052911.

Поиск новых межнуклонных взаимодействий в рассеянии нейтронов на ядре

Д. Д. Шапиро^{1, 2}, В. В. Воронин^{1, 2, 3}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт Петербург, Россия

Известно, что в природе существует 4 вида взаимодействия, однако сейчас в рамках расширения к Стандартной модели физики частиц широко обсуждается существование других взаимодействий, переносимых новыми, неизвестными бозонами [1, 2]. В данной работе обсуждается применение метода нейтронного рассеяния для поиска нового короткодействующего взаимодействия и наложения ограничений на константу связи такого взаимодействия.

Суть метода состоит в осуществлении эксперимента по рассеянию нейтронов на порошке кремния (порошковая дифракция) и получении из спектра информации о зависимости амплитуды рассеяния от переданного импульса (или от угла рассеяния). В рамках данной работы был проведен расчет, показывающий состоятельность этой идеи. Кроме того, исходя из реальных данных, полученных на реакторе FRM II, были вычислены ограничения на константу связи. Показано, что новая оценка не уступает уже имеющимся, что является хорошей мотивацией к проведению полноценного эксперимента.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России 3.3838.2017/4.6.

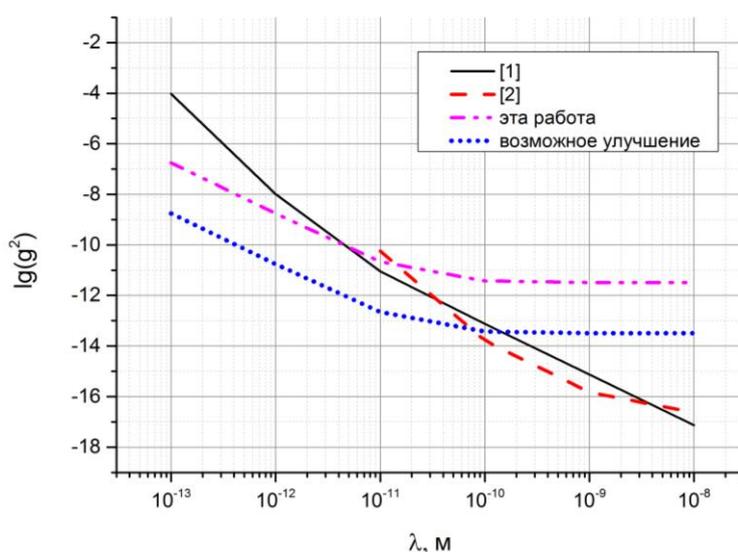


Рис. Ограничения на константу связи

1. V.V. Nesvizhevsky, G. Pignol, K.V. Protasov, Phys.Rev. D 77, 034020 (2008).

2. Y. Kamiya, K. Itagaki, M. Tani, G.N. Kim, and S. Komamiya, Phys. Rev. Lett. 114, 161101 (2015).

Длинноволновые осцилляции интенсивности пучка электронов, отраженного от растущей гетероэпитаксиальной пленки, с учетом неупругого поглощения

С. М. Шкорняков

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

Предложена формула (1) для описания квантового размерного эффекта (КРЭ) блоховских электронов в растущей гетероэпитаксиальной пленке с учетом поглощения. КРЭ проявляется в возникновении дополнительных к коротковолновым (обусловленным интерференцией от поверхности) длинноволновых осцилляциями интенсивности отраженного пучка электронов [1].

$$I = \frac{1}{2}I_0 + I_1R(N)S(N)\cos(2\pi N - \varphi) \quad (1),$$

где $R(N)$ – коэффициент отражения задается формулой (2), $S(N)$ – коэффициент поглощения, задается формулой (3).

$$R = 1 - T = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda}{k} \operatorname{tg} \frac{kc}{2} \operatorname{ctg} \frac{\mu c}{2} - \frac{k}{\lambda} \operatorname{ctg} \frac{kc}{2} \operatorname{tg} \frac{\mu c}{2} \right)^2 \sin^2 \mu c N}, \quad (2)$$

где T – коэффициент прохождения, $\lambda = \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E_1 + V_0)}{\hbar^2}}$,

$E_1 = \left(\frac{\alpha\pi}{180}\right)^2 E$, E – энергия электронов, α – угол скольжения в градусах, V_0 – значение среднего внутреннего потенциала, c – период решетки, μ – блоховский волновой вектор электрона в кристалле, N – число монослоев пленки, параллельных ее поверхности.

$$S = \exp(-\alpha c N), \quad (3)$$

где α – коэффициент поглощения, измеряемый в \AA^{-1} .

1. Шкорняков С. М. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019, № 2, с. 74.
DOI: 10.1134/S0207352819020124.

Пространственное распределение интенсивности отраженного пучка при динамической дифракции тепловых нейтронов в геометриях Лауэ и Брэгга в условиях аномального пропускания

Й. Шмайсер^{1, 2}, Н. О. Елютин¹, А. Н. Тюлюсов^{1, 2}

¹ *НИЦ Курчатовский институт – ИТЭФ, Москва, Россия*

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

Используемые во многих нейтронно-дифракционных экспериментах апертурные системы для коллимации пучка или сканирования поверхности объекта исследования требуют рассмотрения эффектов динамического рассеяния пространственно-модулированной волны на периодической структуре кристалла. Уравнения Такаги – Топена [1] для задачи рентгеновского рассеяния на слабдеформированных кристаллах или пространственно-ограниченных волн позволяют провести обобщения их решения на случай нейтронной дифракции. Данная концепция, называемая методом экстинкционных волн, была применена Бушуевым и Тюлюсовым в работе [2]. Особенностью данного подхода является решение без использования плосковолнового приближения и перехода к решению блоховской волны.

В данной работе рассматривается пространственное распределение интенсивности отраженного пучка тепловых нейтронов ограниченного волнового пакета в случае динамической дифракции в геометриях Лауэ и Брэгга. В работе учитывалось влияние на интенсивность дифрагированного пучка особого интерференционного эффекта – аномального пропускания нейтронов.

1. S. Takagi, Acta Crystallogr. 15, 1311 (1962).

2. В. А. Бушуев, А. Н. Тюлюсов. В сб.: Тез. четвертой нац. конф. по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (Москва, 1999), с. 255.

Эффект адсорбционно индуцируемой стрикции в компактах на основе YSZ-нанопорошков

Д. И. Юренков¹, А. С. Дорошкевич^{2,3}

¹ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Донецкий физико-химический институт им. А. А. Галкина, Донецк, ДНР

В настоящее время актуальной задачей робототехники и микросистемной техники является разработка мощных быстродействующих механических приводов с минимальным энергопотреблением. Одним из вариантов ее решения является использование эффекта реверсионного адсорбционно индуцированного фазового превращения с изменением объема кристаллической решетки [1].

Для исследования эффекта адсорбционной стрикции использовались две серии таблеток из нанопорошков состава $ZrO_2 - 3\% \text{мол } Y_2O_3$ (3YSZ) и $ZrO_2 - 16\% Y_2O_3$ (16YSZ), полученных отжигом при температурах 400, 600, 700 и 800 °С. Каждой температуре отжига соответствовал свой размер частиц [2]. Использованные химические составы материала наночастиц при схожих сорбционных параметрах отличаются устойчивостью к адсорбционному фазовому превращению, в частности, в 3YSZ оно реализуется, а в 16YSZ – нет ввиду высокой степени стабилизации кубической (γ) фазы.

Эксперимент заключался в насыщении таблеток влагой (в течение 24 ч) и последующим измерением массы и диаметра. Установлено, что для образцов из серии 3YSZ значения адсорбционно индуцированного приращения диаметра более чем в 200 раз превышают приращение диаметра таблеток серии 16YSZ (соответственно, 13,5 и 0,06 %) при приращении массы 17 и 14 %. Сделано заключение о трансформационной природе адсорбционно индуцированной стрикции и возможности применения 3YSZ-системы в микросистемной технике при разработке мощных манипуляторов.

1. В. И. Алексеенко, Г. К. Волкова. Адсорбционный механизм фазового превращения стабилизированного диоксида циркония // Журнал технической физики, 2000, Т. 70, Вып. 9. С. 57–62.

2. А. С. Дорошкевич, И. А. Даниленко, Т. Е. Константинова, Г. К. Волкова, В. А. Глазунова. Структурная эволюция нанопорошков диоксида циркония как коагуляционный процесс // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 4. С. 715–717.

Крупномасштабная структура хроматина: фрактальная глобула или логарифмический фрактал?

*Е. Г. Яшина^{1,2}, М. В. Филатов², Р. А. Пантина², Е. Я. Варфоломеева²,
W.G. Bouwman³, C.P. Duif³, V. Pipich⁴, D. Honecker⁵, С. В. Григорьев^{1,2}*

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

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

³ Delft University of Technology, Delft, The Netherlands

⁴ Jülich Centre for Neutron Science at FRM II, Garching, Germany

⁵ Institut Laue–Langevin, Grenoble, France

Рассмотрены две физические модели для описания крупномасштабной структуры хроматина в ядре биологической клетки, находящейся в интерфазном состоянии: модель фрактальной глобулы и модель логарифмического фрактала [1–5]. Основываясь на классификации фрактальных объектов, разработанной с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), показано, что модель фрактальной глобулы не удовлетворяет экспериментальным данным малоуглового рассеяния нейтронов на ядрах биологических клеток. Напротив, модель логарифмического фрактала хорошо описывает экспериментальные данные МУРН, а, следовательно, является хорошим приближением для описания крупномасштабной структуры хроматина. Модель логарифмического фрактала предсказывает, что ядерное пространство заполнено хроматином ровно наполовину, в то время как остальная его половина составляет межхроматиновые пустоты, заполненные нуклеоплазмой, в которой осуществляются различные ядерные процессы. Таким образом, в структурной организации хроматина сбалансированы две противоборствующие тенденции: увеличение площади поверхности хроматина в ядре клетки (доступности для внешних агентов) и уменьшение занимаемого хроматином объема (компактности ядра).

1. Iashina E.G. *et al.* Small-angle neutron scattering (SANS) and spin-echo SANS measurements reveal the logarithmic fractal structure of the large-scale chromatin organization in HeLa nuclei // *Journal of Applied Crystallography*. – 2019. – V. 52. – No. 4. – P. 844–853.

2. Яшина Е. Г., Григорьев С. В. Крупномасштабная структура хроматина: фрактальная глобула или логарифмический фрактал? // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2019. – Т. 156 – №. 3 (9). – С. 540–544.

3. Iashina E.G. *et al.* Additive scaling law for structural organization of chromatin in chicken erythrocyte nuclei // *Physical Review E*. – 2017. – V. 96. – No. 1. – P. 012411.

4. Iashina E.G. *et al.* Spin-echo small-angle neutron scattering study of the structure organization of the chromatin in biological cell // *Journal of Physics: Conference Series*. – IOP Publishing, 2017. – V. 862. – No. 1. – P. 012010.

5. Яшина Е. Г., Григорьев С. В. Малоугловое рассеяние нейтронов на фрактальных объектах // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2017. – №. 9. – С. 5–16.

Эффективность магнитостатического экранирования однослойных и многослойных структур на основе сплавов системы «никель – железо»

Т. И. Зубарь, А. В. Труханов, С. С. Гравбиков

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

Для экранирования магнитостатических обычно используют магнитомягкие материалы (сталь, пермаллой, аморфные металлические сплавы). При рассмотрении магнитостатического экранирования, исходят из принципа шунтирования магнитного поля ферромагнитным материалом [1]. Основная суть данного принципа заключается в замыкании силовых линий через материал с низким сопротивлением магнитному потоку, из чего следует, что эффективность экранирования прямо пропорциональна значениям магнитной проницаемости (μ) материала экрана и обратно пропорциональна площади его поперечного сечения. Однако ранее нами было показано [2], что ряд экспериментальных результатов по магнитостатическому экранированию не согласуется с положениями принципа шунтирования. В настоящей работе исследована эффективность экранирования магнитостатических полей однослойными $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ и многослойными пленочными экранами системы $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}/\text{Cu}$ с целью разработки высокоэффективной защиты приборов и аппаратуры широкого спектра назначения.

Теоретические оценки эффективности экранирования для бесконечного цилиндра, не соответствуют экспериментальным данным, полученным для конечного цилиндрического образца. Показано, что эффективность экранирования является сложной функцией ряда параметров – напряженности внешнего магнитного поля, магнитной проницаемости, линейных размеров экранов и др. С ростом толщины покрытий сплавов $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ наблюдаются эффекты увеличения параметров эффективности экранирования и сдвиг рабочей области в сторону больших магнитных полей, т.е. расширения диапазонов магнитных полей с высокой экранирующей способности. Также происходит снижение влияния размерного эффекта цилиндрических и близких к ним по форме экранов за счет затекания магнитного практически отсутствует при соотношении $l/r \geq 8 \div 9$. В цилиндрических экранах сплавов $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ при изменении величины и знака напряженности магнитного поля наблюдается гистерезис эффективности экранирования, ход зависимостей $\mathcal{E} = \mathcal{E}(H)$ при увеличении и уменьшении напряженности магнитного поля не совпадает – на обратной ветви $\mathcal{E} = \mathcal{E}(H)$ наблюдается эффект увеличения эффективности. При этом многослойность не является фактором, способствующим повышению эффективности экранирования магнитостатического экранирования.

1. А. М. Чернушенко / Конструкции СВЧ устройств и экранов. А. М. Чернушенко. М.: Радио и связь, 1983. 400 с.

2. S.S. Grabchikov, A.V. Trukhanov *et al.* // J. Magn. Magn. Mat. 398, 49–53 (2016).

Thermal properties of $\text{AgCu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$ compounds

Y.I. Aliyev^{1,2}, Y.G. Asadov¹, T.M. Ilyasli³, A.O. Dashdemirov², A.A. Ayubov²

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

² *Azerbaijan State Pedagogical University, Baku, Azerbaijan*

³ *Baku State University, Baku, Azerbaijan*

Inorganic compounds with semiconductor properties are one of the most widely studied objects in modern electronics. It is well-known that one of the most important requirements for materials used in instrumentation is that they are temperature-resistant and, accordingly, have stable physical properties in a wide temperature range. Therefore, it is important to investigate the thermal properties of semiconductor compounds and determine the nature of phase transitions in the region of change of these properties.

In the present work, the AgCuS and with replacement Cu atoms by partial Fe atoms, $\text{AgCu}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}$, $\text{AgCu}_{0.97}\text{Fe}_{0.03}\text{S}$ compounds were synthesized. By the differential thermal analysis method, the thermal properties of these compounds have been investigated, and in the high-temperature region the thermodynamic potentials for each system are determined.

For the synthesis of $\text{AgCu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$ compounds ($0 \leq x \leq 0.03$), the sample weight was calculated by stoichiometric composition and placed in quartz ampoule, and the mouths of the ampoules are soldered and rotating into the furnace. For the synthesis of compounds, B5 brand of Ag and Cu, B2 brand of Fe and sulfur were taken in special purity. Firstly, the temperature of the furnace was increased upto the sulfur melting point ($T = 395$ K). After being kept at that temperature for $t = 4-5$ h, which means, after the reaction of metals (Ag, Cu and Fe) with sulfur, the temperature increased to the melting temperature of the compound ($T = 1410$ K) and kept at the indicated temperature for $t = 4-5$ h, then the furnace was cooled with 60 K/h along with the ampoules.

Thermal properties of the samples were performed on a Perkin Elmer STA 6000 device at a temperature range $T = 300-1300$ K using the Differential Thermal Analysis method. Measurements were made at a speed of 5 K/min. The cooling process was achieved with the help of the PolyScience analyzer cooling system and “digital temperature controller”.

In the differential thermal analysis spectrum obtained at a temperature range of $300 \text{ K} \leq T \leq 1300 \text{ K}$, endoeffect corresponding to the structural phase transition in the AgCuS compound was observed at the temperature $T = 938$ K. It has been determined that this result is also observed in the $\text{AgCu}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{S}$ compound obtained by partial replacement of Cu atoms by Fe atoms. However, in the compound of $\text{AgCu}_{0.97}\text{Fe}_{0.03}\text{S}$ this effect was observed at higher temperatures. The thermal capacities and enthalpies of phase transitions were calculated for the given compounds.

Low-temperature spin dynamics in TmFeO₃ orthoferrite with non-Kramers ion

S.A. Skorobogatov^{1, 2}, *S.E. Nikitin*^{3, 4}, *K.A. Shaykhutdinov*¹, *A.D. Balaev*¹,
*K.Yu. Terentjev*¹, *G. Ehlers*⁵, *G. Sala*⁶, *E.V. Pomjakushina*⁷,
*K. Conder*⁷, *A. Podlesnyak*⁶

¹ Kirensky Institute of Physics, Krasnoyarsk, Russia

² Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

³ Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany

⁴ Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

⁵ Neutron Technologies Division, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA

⁶ Neutron Scattering Division, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA

⁷ Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland

Rare-earth orthoferrites with general composition $R\text{FeO}_3$ (R – rare-earth ion) are oxide magnetic materials, which exceptional properties such as spontaneous spin-reorientation transition [1], laser-pulse induced ultrafast spin rotation [2] and anisotropic magnetic entropy evolution [3] are in a focus of close attention in a modern solid-state physics. These materials consist of two sublattices: the ordering of strongly bonded Fe^{3+} sublattices occurs at $T_N \approx 600$ K and the rare-ion sublattices with an ordering temperature of the order of ~ 10 K. It is believed that the 3d-4f interaction is responsible for various unusual properties of orthoferrites, however, there is no macroscopic model, describing this interaction.

In this work, we attempt to address this problem by studying a full spin-wave spectrum of TmFeO_3 using single-crystal time-of-flight neutron spectroscopy. We studied a ~ 4 g sample of TmFeO_3 grown by a floating zone technique. Neutron scattering measurements were performed using ARCS ($E_i = 100$ meV) and CNCS ($E_i = 3.32$ and 12 meV) instruments at Oak Ridge National Lab to cover different energy ranges. Investigating spin dynamics at two different energy scales: Fe^{3+} (~ 60 meV) and low-energy subsystems Tm^{3+} (~ 4.5 meV) [4, 5].

We described high-energy data using linear spin-wave model and determined exchange interactions within the Fe^{3+} subsystem, which exhibit pronounced anisotropy between in and out-of-plane interactions. Magnetic excitation spectrum of Tm^{3+} subsystem consists of two CEF transitions dispersive due to Tm-Tm exchange interaction. These excitations located at the energy range below the gap of Fe^{3+} magnons. We performed point charge model calculations and reproduced the main features of the observed transitions as well as bulk magnetization data [6].

1. R.L. White, J. Appl. Phys. 40, 1061 (1969).
2. A.V. Kimel *et al.*, Nature (London) 435, 655 (2005).
3. Y.J. Ke *et al.*, Sci. Rep. 6, 19775 (2016).
4. S.M. Shapiro *et al.*, Phys. Rev. B10, 2014 (1974).
5. S.E. Nikitin *et al.*, Phys.Rev. B 98, 064424 (2018).
6. S.A. Skorobogatov *et al.*, Phys. Rev. B 101, 014432 (2020).

**Neutron depth profiling: a method of choice
to *operando* study lithium ions transport in solid-state batteries**

*E. Vezhlev¹, A. Ioffe¹, S. Mattauch¹, K. Friese², Ch. Chen³, D. Danilov³,
P.H.L. Notten^{3,4}, Th. Brückel²*

¹ *Jülich Centre for Neutron Science (JCNS-4) at Heinz Maier-Leibnitz-Zentrum (MLZ),
Forschungszentrum Jülich GmbH, Garching, Germany*

² *Jülich Centre for Neutron Science (JCNS-2) and Peter Grünberg Institut (PGI-4),
Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, Germany*

³ *Institute of Energy and Climate Research, Fundamental Electrochemistry (IEK-9),
Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, Germany*

⁴ *Eindhoven University of Technology, Department of Chemical Engineering and Chemistry,
Department of Electrical Engineering, Eindhoven, the Netherlands*

Operando observation of Li-ions transport in all-solid-state thin-film batteries during fast dis/charging, as well as the study of mechanisms of battery aging (e.g. formation of interfaces), become possible by performing Neutron Depth Profiling (NDP) measurements at high flux neutron beamlines.

For this aim we have recently built and successfully tested a new NDP spectrometer at the JCNS. New spectrometer utilizes a high flux focused cold neutron beam of the reflectometer MARIA (MLZ, Germany) and is equipped with the multi-detector setup for more effective collection of charged particles. This arrangement allows for sufficiently high counting rates necessary for fast, about tens of seconds, measurements of battery samples with the requirement of a fine, of an order of 10 nm, depth resolution. Results of the first test measurements of full cell solid-state batteries and electrodes in “as deposited”-state will be presented.

Как вода выходит из структуры NaBiO_3 ?

Г. А. Вальковский, А. А. Мистонов, М. Г. Шеляпина

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Повышенный интерес к висмутату натрия (NaBiO_3) в последние годы обусловлен, в частности, перспективностью его применения в фотокатализе. Однако, при промышленном синтезе помимо безводной фазы (пр. группа R-3) зачастую образуется гидратированная фаза (пр. группа P-3), содержащая воду в структуре, в результате чего исходный образец представляет собой смесь обеих фаз. Всё, что касается гидратированной фазы – малоизучено и особенно любопытно, учитывая также и то, что в некоторых работах отмечается лучшая фотокаталитическая активность данной фазы [1]. До недавнего времени её структура оставалась нерешённой, но и после публикации [2], остаётся открытым вопрос о том, как происходит экспериментально наблюдаемое превращение гидратированной фазы в безводную при нагревании. Как вода выходит из структуры?

Для ответа на этот вопрос мы использовали методы рентгеновской дифрактометрии (в том числе на синхротроне), сканирующей электронной микроскопии, ядерно-магнитного резонанса, неупругого рассеяния нейтронов, ИК-спектроскопии.

Исследование выявило, что температура выхода воды из структуры гидратированной фазы зависит от того, находится образец на открытом воздухе или в капилляре. Фазовое превращение из гидратированной в безводную фазу происходит через промежуточную фазу, характеризующуюся значительными микродеформациями. В процессе нагрева слоистая структура гидратированной фазы сильно расширяется вдоль оси c , выпуская воду, при этом вдоль оси a за счёт атомных перестроек происходит даже небольшое сжатие.

1. Y. Feng, X.M. Huang, Q. Zhan, D. Jiang, J. Mat. Sci: Materials in Electronics 30, 10543 (2019).
2. M. Saiduzzaman, S. Yanagida, T. Takei *et al.*, Inorganic Chemistry 57 (15), 8903 (2018).

Структурные модели активных центров меди в мордените при жидкофазном синтезе по данным спектроскопии рентгеновского поглощения

*В. А. Дурьманов, В. В. Срабионян, Г. Б. Сухарина, А. М. Ермакова,
С. В. Базовая, Т. И. Курзина, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Высокая доступность метана стимулирует интерес к усовершенствованию методов его переработки в жидкое топливо и химикаты, в частности метанол, являющийся одним из основных прекурсоров в химической промышленности. Несмотря на то, что уже сейчас существуют методы, позволяющие получать метанол из метана с помощью синтез-газ методов, эти методы являются дорогостоящими, и экономически выгодными только в промышленных масштабах.

Основным препятствием в прямом окислении метана до метанола является более высокая реактивность последнего, что способствует его полному окислению до CO_2 . Одним из возможных способов превращения метана в метанол является частичное окисление метана на металлосодержащем цеолитном катализаторе с высокой селективностью.

В работе [1] было показано, что при циклическом режиме превращения метана в метанол, для Cu-морденита полученного посредством водного ионного обмена с использованием ацетата меди ($\text{C}_4\text{H}_6\text{CuO}_4$), наблюдалось увеличение выхода метанола минимум на 30 % начиная со второго цикла и в дальнейшем оставалось постоянным.

В данной работе рассмотрены модели активных центров, реализуемых в Cu-MOR, полученного методом водного ионного обмена, в рамках первого и второго каталитического цикла в реакции окисления метана в метанол. Рассмотрение структурных моделей проводилось в рамках спектроскопии рентгеновского поглощения и моделирования методами теории функционала плотности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), темы № 18-72-00096.

1. Vozbag S.E. *et al.* Methane to methanol over copper mordenite: yield improvement through multiple cycles and different synthesis techniques // Catalysis Science & Technology. – 2016. – V. 6. – No. 13. – P. 5011–5022.

Устойчивость восстановления функции распределения частиц по размерам от системы полидисперсных сферических частиц по данным малоуглового рассеяния

П. В. Конарев^{1, 2}, А. Е. Крюкова^{1, 2}, В. В. Волков¹

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

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

Основной проблемой при поиске распределений является плохая обусловленность обратной задачи: число обусловленности матрицы вторых производных минимизируемой целевой функции может достигать десятков и сотен миллионов, что приводит к сильной зависимости решения не только от ошибок в исходных данных, но и от реализации алгоритма поиска, и от величин стартовых значений параметров модели.

Для анализа полидисперсных объектов в растворе по малоугловым данным разработан ряд программ, в частности, GNOM [1], MIXTURE [2], SASFIT [3], McSAS [4] и др. Среди подходов к получению распределения частиц по размерам, реализованных в данных программах, можно выделить несколько основных:

(1) Использование метода решения линейной задачи наименьших квадратов с регуляризацией по Тихонову, реализованного в программе GNOM [1] из пакета ATSAS [5];

(2) Поиск распределения в виде суперпозиции постулированных аналитических гладких функций (например, нормального, лог-нормального типов и др.) (SASFIT [3], MIXTURE [2] из пакета ATSAS [5]);

(3) Построение гистограммы распределения частиц по размерам (McSAS [4], VOLDIS).

В данной работе рассмотрены случаи двух- и трехкомпонентных систем полидисперсных сферических частиц с разнесенными и частично перекрывающимися распределениями компонент. Показано, что на незашумленных данных все три подхода позволяют найти практически точное решение, однако на зашумленных данных разброс функции распределений в ряде случаев оказывается существенным.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-90190).

1. D.I. Svergun. J. Appl. Cryst. 25, 495 (1992).
2. P.V. Konarev *et al.* J. Appl. Cryst. 36, 1277 (2003).
3. I. Bressler *et al.* J. Appl. Cryst. 48, 1587 (2015).
4. I. Bressler *et al.* J. Appl. Cryst. 48, 962 (2015).
5. D. Franke *et al.* J. Appl. Cryst. 50, 1212 (2017).

Фазовый переход в тонких пленках GST-225: исследование методом синхротронной дифракции в геометрии скользящего отражения

И. И. Николаев, Н. А. Григорьева

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Энергонезависимая фазовая память (PCM – Phase Change Memory) на основе быстротекущих, обратимых фазовых переходов «аморфное ↔ кристаллическое состояние» в нанобъеме халькогенидного полупроводника – один из кандидатов на память нового поколения. PCM представляет собой массив ячеек, который формирует значение параметров «ноль» – аморфное состояние и «единица» – кристаллическое состояние.

Методом термического напыления в вакууме были получены аморфные пленки $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Элементный анализ методом просвечивающей электронной микроскопии показал, что на интерфейсах тонкой пленки наблюдается отклонение от стехиометрического состава GST-225: граница раздела пленка/воздух более обогащена сурьмой, в то время как граница раздела пленка/подложка более обогащена теллуром относительно состава GST-225, при этом интегрально элементный состав полученных пленок соответствует стехиометрическому соединению $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Расчет отношения $\text{Ge}/(\text{Sb}+\text{Te})$ на различных срезах по толщине пленки в сравнении с теоретическими значениями для GST-225, GST-147 и GST-124, указывает на возможное сосуществование двух кристаллических фаз GST-225 и GST-147 при отжиге пленки.

С помощью *in-situ*-метода дифракции синхротронного излучения в скользящей геометрии были получены дифракционные картины на пленках Ge-Sb-Te в аморфном и кристаллическом состояниях в интервале температур от 100 до 350 °C, что соответствует интервалу температур вблизи 2 фазовых переходов: переход аморфная – кристаллическая кубическая фаза, переход кристаллическая кубическая фаза – кристаллическая гексагональная фаза.

Определено, что исходная аморфная пленка в диапазоне температур $120\text{ °C} \leq T \leq 140\text{ °C}$ кристаллизуется в две кристаллические фазы – кубическую GST-225 с пространственной группой $F_{m\bar{3}m}$ и тригональную GST-147 с пространственной группой $P_{\bar{3}m1}$. При $T = 122.99\text{ °C}$ появляется тригональная фаза GST-147, за которой следует кристаллизация фазы GST-225 начиная с $T = 126.85\text{ °C}$. При $T = 178\text{ °C}$ начинается переход фазы GST-225 из кубической в тригональную фазу. Анализируя температурные зависимости параметров брэгговских максимумов в диапазоне температур 190–350 °C, взяв за рассмотрение самый интенсивный пик кубической фазы GST – 225 – (200), было определена температура полного исчезновения кубической фазы – $T = 225.69\text{ °C}$.

Данные результаты противоречат имеющимся литературным данным по определению структуры и температурам фазовых переходов кристаллических пленок системы Ge-Sb-Te [1, 2].

1. Simone Raoux, Wojciech Welnic, and Daniele Ielmini, Phase Change Materials and Their Application to Nonvolatile Memories. Simone Raoux, *Chem. Rev.*, 2010, 110 (1), pp. 240–267.
2. Н. А. Богословский, К. Д. Цэндин, Физика эффектов переключения и памяти в халькогенидных стеклообразных полупроводниках, *Физика и техника полупроводников*, 2012, том 46, вып. 5, с. 577–608.

**Малоугловое рентгеновское рассеяние
как метод структурной диагностики белковых макромолекул
на примере эктодомена инсулиноподобной рецепторной тирозинкиназы**

*М. В. Петухов^{1,2}, А. А. Можяев^{1,3}, И. Е. Деев³, Л. А. Дадинова¹, В. В. Волков¹,
С. М. Джеффрис⁴, Д. И. Свергун⁴, А. Г. Петренко³, Э. В. Штыкова¹*

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова*

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

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

³ *Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН,
Москва, Россия*

⁴ *Европейская лаборатория молекулярной биологии, Гамбургский филиал, Гамбург, Германия*

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) – быстроразвивающийся метод, позволяющий изучать структуру разупорядоченных и слабо упорядоченных объектов в широком диапазоне размеров и молекулярных масс. Метод особенно важен для изучения строения биологических макромолекул в растворе, т. е. в условиях, близких к физиологическим [1]. Так, в настоящей работе с помощью МУРР впервые была определена структура орфанного белка, участвующего в регуляции кислотно-щелочного баланса – рецепторной тирозинкиназы семейства инсулиновых рецепторов (IRR) [2]. Структурные особенности IRR анализировались с помощью программного пакета ATSAS [3]. Первичная обработка и предварительная интерпретация данных малоуглового рассеяния проводилась с помощью программы PRIMUS, а для установления детальной конформации белка в растворе при разных рН использовались различные подходы, в том числе метод молекулярной тектоники и гибридные методы. Алгоритм AMBIMETER применялся для априорной оценки неоднозначности восстановления формы по данным МУРР. *Ab initio* определение формы IRR было проведено, используя подход конечных объемных элементов (программа DAMMIN). Структуры атомного разрешения доменов рецептора инсулина, ближайшего гомолога IRR, были использованы для гибридного моделирования в программе CORAL, в которой совмещаются методы молекулярной тектоники и *ab initio* восстановления конформации гибких линкеров.

Данная работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), проект 17-00-00487-КОМФИ.

1. Svergun D.I., Koch M.H., Timmins P.A., May R.P. (2013) *Small Angle X-ray and Neutron Scattering from Solutions of Biological Macromolecules*. Oxford University Press, London.
2. Shtykova E.V., Petoukhov M.V., Mozhaev A.A., Deyev I.E., Dadinova L.A., Loshkarev N.A., Goryashchenko A.S., Bocharov E.V., Jeffries C.M., Svergun D.I., Batishchev O.V., Petrenko A.G. (2019) *J. Biol. Chem.* 294: 17790–17798.
3. Franke D., Petoukhov M.V., Konarev P.V., Panjkovich A., Tuukkanen A., Mertens H.D.T., Kikhney A.G., Hajizadeh N.R., Franklin J.M., Jeffries C.M., Svergun D.I. (2017) *J. Appl. Crystallogr.* 50: 1151–1158.

К теории многоволновой динамической дифракции рентгеновского излучения на деформированных кристаллах

Т. Чен

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

Развита теория многоволновой динамической дифракции жесткого рентгеновского излучения на деформированных кристаллах. Рассмотрены следующие виды деформации кристалла: 1) механический изгиб (слабый и сильный изгиб), 2) температурный градиент, 3) ультразвуковые колебания. Показано, что многоволновая дифракция рентгеновского излучения на деформированных кристаллах чувствительна к радиусу изгиба кристаллов, величине температурного градиента, амплитуде и частоте ультразвуковых колебаний. Рассмотрены динамические эффекты, возникающие при дифракционном отражении рентгеновского излучения от деформированных кристаллов, такие как фокусировка и пространственная концентрация рентгеновского излучения, управление этим излучением, монохроматизация. Детально рассмотрены случаи трех- и шестиволновой дифракции излучения.

***In situ* синхротронное исследование кинетики анионного обмена в Zn-Al слоистых двойных гидроксидах**

М. Х. Юзвюк¹, И. А. Зобкало¹, А. С. Bouali², Г. Довженко^{1, 2}, М. В. Сердечнова²,
D.C.F. Wieland², К.А. Yasakau³, М. Л. Желудкевич²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Helmholtz-Zentrum, Geesthacht, Germany

³ CICECO – Aveiro institute of materials, Aveiro, Portugal

Исследования слоистых двойных гидроксидов (СДГ) являются перспективным направлением, т. к. эти соединения могут быть использованы в качестве наноконтейнеров для ингибиторов коррозии с их последующим контролируемым выделением и служить в качестве высокоэффективных антикоррозионных нетоксичных материалов [1]. В общем случае СДГ описываются формулой $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^{y-}]_{x/y} \cdot zH_2O$, где $M^{II, III}$ и A^{y-} – катионы металлов и межслоевой анион соответственно.

Данная работа связана с изучением кинетики анионного обмена в Zn-Al СДГ, выращенном на поверхности цинка. В ходе *in situ* синхротронного эксперимента было исследовано 3 процесса анионного обмена: нитрат-анионы (NO_3^-) заменялись на анионы хлора (Cl^-), сульфата (SO_4^{2-}) и ванадата (VO_x^{y-}). Кристаллографический анализ показал, что структура СДГ-Cl описывается пр.гр. *R-3m*, как и родительское соединение СДГ- NO_3 . Однако структура СДГ- SO_4 описывается уже группой *P-3*. Качество рентгенограммы СДГ- VO_x не позволило сделать выводы о структуре соединения.

Анализ процессов анионного обмена был проведен с использованием модели Аврами-Ерофеева [2]. Реакции обмена $NO_3^- \rightarrow Cl^-$, $NO_3^- \rightarrow SO_4^{2-}$ являются двухстадийными; первая стадия характеризуется 2D диффузионно-контролируемой реакцией, замедляемой нуклеацией, а вторая – 1D диффузионно-контролируемой реакцией, также замедляемой нуклеацией. В случае обмена $NO_3^- \rightarrow Cl^-$ нитрат-анионы высвобождаются полностью, а в случае $NO_3^- \rightarrow SO_4^{2-}$ реакция заканчивается без их полного выделения.

Обмен $NO_3^- \rightarrow VO_x^{y-}$ является одностадийным 2D процессом, который можно охарактеризовать как реакцию с мгновенной нуклеацией и идет намного медленнее предыдущих. В результате этого процесса появляются две кристаллические фазы с различными поливанадатными формами, предположительно $V_4O_{12}^{4-}$ и $V_2O_7^{4-}$, нитрат-анионы полностью не высвобождаются.

Скорость замены анионов NO_3^- на гостевые убывает согласно последовательности: $Cl^- > SO_4^{2-} > VO_x^{y-}$.

1. M. Serdechnova, A.N. Salak *et al.* J. Solid State Chem., 233 (2016).

2. G.R. Williams, A.I. Khan *et al.* Struct Bond, 119 (2006).

Определение параметров решетки в слабоупорядоченных слоях по данным GIXD с малым количеством рефлексов

Л. Г. Янусова, С. Б. Астафьев

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

Важным направлением в области нанотехнологий является развитие методов исследования структурных особенностей тонкопленочных систем, сформированных на жидкой субфазе и на твердых подложках.

Получить разностороннюю информацию о характере молекулярной упорядоченности, как в плоскости слоя, так и вдоль нормали к нему, позволяет сочетание рефлектометрических измерений (XRR) и измерений в геометрии скользящего падения GIXD, с использованием синхротронного рентгеновского излучения. Для исследования профиля электронной плотности многослойных структур ранее авторами были разработаны методы математической обработки экспериментальных данных, вошедших в аналитический пакет BARD [1, 2]. Данные методы использовались для изучения структурных особенностей слоев макрогетероциклических соединений порфиринового типа на поверхности воды [3]. Однако, при обработке данных GIXD для слабоупорядоченных пленок потребовались методы, пригодные для изучения малоинформативных дифракционных картин с малым количеством рефлексов. При исследовании органических ленгмюровских пленок в геометрии GIXD в экваториальной области было выявлено несколько структурных рефлексов, из которых значимыми можно было считать не более 3 пиков, соответствующих межплоскостным периодам: $d = 1.366, 1.516, 1.915 \text{ \AA}$ соответственно.

Попытка получить структурную информацию о слабоупорядоченных слоях из таких дифрактограмм, привела к разработке метода, сочетающего использование основных формул структурной кристаллографии с алгоритмами минимизации применительно к нескольким основным рефлексам, характерным для искомой кристаллической решетки. Расположение рефлексов указывало на наличие агрегатов, упорядоченных по нормали к плоскости слоя, что позволяло ограничиться поисками двумерной кристаллической сетки со сторонами a, b и углом γ между ними. В результате были найдены структурные параметры $a = b = 9.2 \text{ \AA}$ и $\gamma = 89^\circ$ и проиндексированы соответствующие рефлексы: 020, 210, 220. В настоящее время пакет BARD дополнен алгоритмом поиска параметров решетки и индексации дифрактограмм с малым количеством рефлексов для двумерного случая.

1. С. Б. Астафьев, Б. М. Щедрин, Л. Г. Янусова. Кристаллография, 141, 57 (2012).
2. С. Б. Астафьев, Б. М. Щедрин, Л. Г. Янусова. Кристаллография 311, 62 (2017).
3. L.A. Maiorova, S.B. Astaf'ev, L.G. Yanusova, B.M. Shchedrin, O.V. Kononov, V.V. Erokhin, O.I. Koifman. Сборник трудов XII заседания Научного Совета РАН по физике конденсированных сред. Черноголовка, 34 (2019).

Межатомные переходы в рентгеновской электронной спектроскопии

В. И. Гребенников

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

Методы рентгеновской фотоэмиссионной и Оже-спектроскопии, включая рентгеновскую фотоэлектронную дифракцию и голографию, являются мощным инструментом для исследования поверхности. Важное значение имеет определение механизмов распада фотовозбужденных состояний [1]. В докладе обсуждается возможность эволюции фотодырки на внутреннем уровне ~ 1000 эВ с выбросом электрона из соседнего атома.

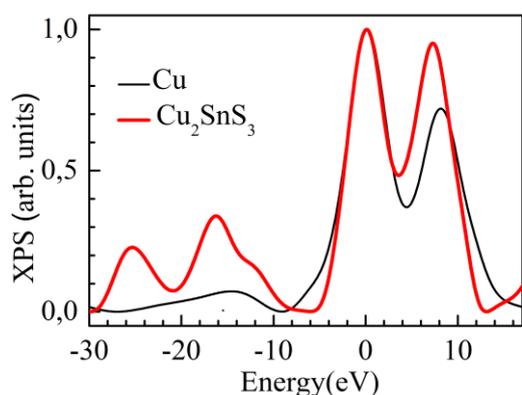


Рис. $CuL_3M_{2,3}V$ Оже-линия в соединении Cu_2SnS_3 и в металлической меди.

В соединении наблюдается межатомный переход $CuL_3M_{2,3}SnN_{4,5}$ с энергией на 26 эВ ниже основной линии

Поиски такого межатомного Оже-перехода велись несколько десятков тому назад. В итоге все свелось к обсуждению тонких особенностей спектров валентных полос, в которых состояния компонентов перемешаны и различие в энергии составляют доли эВ. Мы экспериментально обнаружили межатомные переходы, энергия которых на десятки эВ отличается от энергии внутриатомного Оже-перехода. На рисунке показана двойная $CuL_3M_{2,3}V$ Оже-линия (переход $2p_3$ -дырки (энергия связи 933 эВ) на $3p$ -уровень (77 эВ) с выбросом электрона из валентной полосы

в свободное состояние). За начало отсчета взята кинетическая энергия 838 эВ. Спектр соединения имеет две характерные особенности, которые отсутствуют в спектре чистой меди. Это интенсивный межатомный переход $CuL_3M_{2,3}SnN_{4,5}$ с энергией на 26 эВ ниже основной линии. Электрон выбрасывается не из возбужденного атома меди, а из $4d$ -уровня соседнего атома олова.

Внезапное появление фото-дырок создает динамическое поле, которое вызывает встряхивание электронов, в том числе, соседних атомов. В соединениях с узкой валентной зоной интенсивными внутренними уровнями с энергией связи десятки электрон-вольт (In, Sn 4d) возникает сильное кулоновское взаимодействие между электронами и дырками на соседних атомах, которое порождает интенсивные межатомные переходы в мягком рентгеновском диапазоне.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ-20-02-00541.

1. V.I. Grebennikov, T.V. Kuznetsova, Phys. Status Solidi A, 216, 1800723 (2019).

Study of nanoparticle formation in ODS steel using X-ray absorption spectroscopy

A. Cintins¹, A. Anspoks¹, A. Kuzmin¹, J. Purans¹, N. Ordas²

¹ Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

² University Navarra, CEIT IK4, Donostia San Sebastian, Spain

Oxide dispersion strengthened ferritic stainless (ODS FS) steels are candidates for structural components in future fusion and fission reactors, concentrated solar power plants, chemical reactors or advanced coalfired plants [1]. They have high strength and creep resistance at elevated temperatures as well as good resistance to neutron radiation damage [1]. An important requirement is the presence of a high concentration of nanosized oxide particles in the alloy matrix. The conventional processing route of ODS steel includes mechanical alloying (MA). However, MA involves several drawbacks including the time and cost inefficiency, the contamination from the grinding media, *etc.* An innovative method, called STARS [2] and avoiding the mechanical alloying, was developed by CEIT-IK4 to produce ODS alloys.

In this study, we took a closer look at the local structure of Y and Ti atoms in ODS steels produced by CEIT-IK4 using X-ray absorption spectroscopy (XAS). XAS measurements were performed in fluorescence mode at the BL22 – CLÆSS beamline of the ALBA synchrotron. We have studied dependencies of the local structure on different manufacturing stages.

The analysis of the Y and Ti K-edge X-ray absorption near edge structure (XANES) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) allowed us to reveal changes in Y and Ti oxidation state and local structure as a function of the production process.

1. Ordás N., Gil E., Cintins A. *et al.* The role of yttrium and titanium during the development of ODS ferritic steels obtained through the STARS route: TEM and XAS study. *J Nucl Mater.* 2018; 504: 8–22. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2018.03.020
2. Pazos D., Cintins A., de Castro V. *et al.* ODS ferritic steels obtained from gas atomized powders through the STARS processing route: Reactive synthesis as an alternative to mechanical alloying. *Nucl Mater Energy.* 2018; 17:1-8. doi:10.1016/j.nme.2018.06.014

Evolution of the local structure in molybdates probed by X-ray absorption and resonant X-ray emission spectroscopy

*I. Jonane*¹, *A. Anspoks*¹, *A. Cintins*¹, *A. Kalinko*², *R. Chernikov*³, *A. Kuzmin*¹

¹ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Latvia*

² *Universität Paderborn, Naturwissenschaftliche Fakultät, Department Chemie, Germany*

³ *DESY Photon Science, Germany*

Copper molybdate (CuMoO_4) is a multifunctional material exhibiting several chromic-related properties such as thermochromism, piezochromism, tribochromism and halochromism, thus it is promising for different technological applications. However, the structure-property relationship must be understood to learn how to control the functionality of the material.

The p-T diagram of pure CuMoO_4 has been established in [1]. At normal pressure, pure CuMoO_4 exists in two phases – low-temperature γ -phase with a brownish colour and high temperature green coloured α -phase. The hysteretic-type transition from the γ -to- α phase, accompanied with colour change, occurs in the temperature range of 230–280 K upon heating, whereas the α -to- γ transition occurs between 120 and 200 K upon cooling [2, 3]. It is possible to affect the p-T diagram of CuMoO_4 and, thus, its optical properties by chemical doping: *e.g.*, by substitution of Mo^{6+} ions with W^{6+} or Cu^{2+} with other divalent ions like Zn^{2+} , Co^{2+} , *etc.*

To understand the relationship between structural and thermochromic properties in CuMoO_4 and $\text{CuMo}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_4$ ($x=0-0.75$) solid solutions, we performed temperature and composition-dependent X-ray absorption spectroscopy study at the Cu and Mo K-edges and W L_3 -edge. Linear combination analysis of the Mo K-edge X-ray absorption near-edge structure (XANES) allowed us to determine the hysteresis of the low-temperature phase transition [2]. Extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectra were interpreted using the reverse Monte Carlo (RMC) modelling [3, 4] to probe the change in the local atomic structure. The role of tungsten ions was studied in more detail using resonant X-ray emission spectroscopy (RXES), which allowed us to trace the crystal-field-induced splitting of the 5d states of tungsten.

1. M. Wiesmann, H. Ehrenberg, G. Miehe, T. Peun, H. Weitzel, H. Fuess, J. Solid State Chem. 132, 88 (1997).
2. I. Jonane, A. Cintins, A. Kalinko, R. Chernikov, A. Kuzmin, Low Temp. Phys. 44, 568–572 (2018).
3. I. Jonane, A. Cintins, A. Kalinko, R. Chernikov, A. Kuzmin, Rad. Phys. Chem. (2019).
4. J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans, J. Phys.: Condens. Matter 26, 055401 (2014).

Физические свойства твердых растворов $(1-x)\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3 - x\text{PbTiO}_3$

*Б. К. Абдулвахидов¹, И. П. Дмитренко², М. А. Сирота³, И. В. Мардасова³,
М. А. Витченко³, К. Г. Абдулвахидов²*

¹ *Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

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

³ *Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия*

В предлагаемой работе впервые твердофазным колумбитным методом получены твердые растворы $(1-x)\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3 - x\text{PbTiO}_3$, обладающие физическими свойствами, характерными для релаксорных сегнетоэлектриков. В то же время этим составам характерны и магнитные свойства, что представляет интерес для комплексного и детального изучения их. На данном этапе нами проведен элементный анализ составов, рентгеноструктурная характеристика, изучены оптические и рентгеновские спектры поглощения и диэлектрические свойства в широком диапазоне температур и частот.

Обнаружено, что в стартовом составе $\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ всегда присутствует дополнительная кубическая фаза с параметром элементарной ячейки $a = 4.003 \text{ \AA}$. Основная сегнетоэлектрическая (магнитная) фаза вероятно является моноклинной. С ростом концентрации второго компонента формируется область морфотропного фазового перехода. На диэлектрических температурных зависимостях четко выделяются аномалии, соответствующие двум сосуществующим фазам. В этой области кубическая фаза не наблюдается.

Ранее нами аналогичные измерения были проведены на твердых растворах $(1-x)\text{PbMn}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3 - x\text{PbTiO}_3$ [1], и они имеют схожие свойства с результатами данной работы.

1. B.K. Abdolvakhidov, K.G. Abdolvakhidov, A.P. Budnyk, S.A. Sadykov, T.A. Lastovina, M.A. Sirota, I.P. Dmitrienko, A.L. Bugaev, P.S. Plyaka, M.A. Vitchenko, I.V. Mardasowa, A.V. Soldatov. Mater. Res. Express (2019), V. 6. No. 12.

Анодная модификация алюминиевой фольги для повышения емкости электролитического конденсатора

А. М. Аблакатов^{1, 2}, Р. Г. Валеев³

¹ *ОАО «Элеконд», Сарапул, Россия*

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

³ *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

Алюминиевые конденсаторы широко применяются в радиоэлектронной аппаратуре. Такие конденсаторы состоят из анодной и катодной фольг, разделенных электротехнической бумагой, пропитанной рабочим электролитом, который выступает в качестве катодной обкладки. В качестве анода используется фольга, имеющая высокоразвитую поверхность со сформированным на ее поверхности оксидным слоем, выступающим в роли диэлектрика. Катодом является фольга, емкость которой не менее чем в 10 раз должна превышать емкость анодной.

Рабочий электролит представляет из себя смесь органических растворителей, неорганический или органических кислот, аминов и специальных добавок и должен обеспечивать доформовку микроповреждений на аноде, вызванных в результате технологического процесса изготовления конденсаторов.

Целью данной работы является анодная модификация поверхности фольги алюминия для получения на их базе конденсаторов с лучшими показателями электропараметров, чем у стандартных.

Анодирование фольги для анода конденсатора толщиной 160 мкм проводилось при напряжении 25 В в 0,3 М растворе серной кислоты, и при напряжении 40 В – в 0,3 М растворе щавелевой кислоты. После снятия оксидного слоя после анодирования в растворе (из расчета на 100 мл) 20 г/л CrO_3 + 35 мл/л H_3PO_4 + H_2O дист. получили поверхность фольги со сферическими углублениями (рис. 1). При изготовлении секций конденсаторов (рис. 2) в качестве анода использовали модифицированную фольгу, а в качестве катода – фольгу, изготовленную промышленным способом. В результате на секции получили емкость 6 мкФ при напряжении 20 В, что превышает емкость секции, изготовленной из стандартной анодной фольги, более чем в 2 раза.

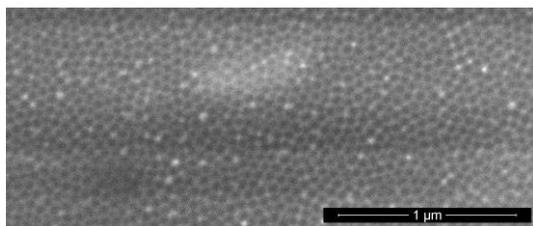


Рис. 1. СЭМ-изображение поверхности модифицированной фольги



Рис. 2. Изображение сегмента конденсатора

Твердые растворы $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$ – перспективные материалы в негатронике

У. М. Агаева

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

Прогресс в области функциональной электроники в значительной степени обусловлен также использованием многокомпонентных твердых растворов и гетерогенных полупроводниковых систем, что связано с возможностью путем изменения состава, целенаправленно изменить зонную структуру и физических свойств материала. Из этих компонентов, играющих важную роль во многих соединениях и твердых растворах, являются редкоземельные элементы, интерес к которым возрос ввиду расширяющегося фронта их использования. Как было отмечено в работе [1, 2], замещением часть атомов индия с атомами редкоземельных элементов в соединениях обнаружены ряд твердых растворов с уникальными свойствами. В частности вольтамперные характеристики твердых растворов $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$ содержат участки с отрицательными дифференциальными сопротивлениями (ОДС), использование в приборах которых позволяет решать многие технические задачи, недоступные классической транзисторной электронике.

В настоящее время наиболее интенсивные исследования проводятся в направлении создания и применения полупроводниковых негатронов [3]. Здесь четко вырисовывались два основных направления: 1) негатроны на базе полупроводниковых структур, использующих физические процессы в р-п-переходе; 2) негатроны на базе физических процессов в полупроводниковых кристаллах различных структур.

Физические механизмы возникновения явлений электрической неустойчивости, приводящие к ОС в разных полупроводниковых материалах сложны и многообразны и зависят от множества конструктивно-технологических факторов. Толщины пленок, размера зерен, степени легирования и др. Однако основные принципы, приводящие к появлению ОС на ВАХ, одинаковы для всех структур и аналогичны с условиями, существующими в приборах с ОС на р-п-переходах: необходимо, чтобы проводимость базы увеличивалась не только за счет инжекции носителей в базу, но и какого-либо дополнительного механизма, которым может быть увеличение времени жизни, биполярной подвижности носителей, тепловой эффект и т. д. Отрицательная емкость в аморфных пленках наблюдается вблизи порогового напряжения и в области ОС. Интерес к таким полупроводникам объясняется наличием наряду с индуктивной составляющей еще и активного сопротивления, позволяющего существенно повысить добротность.

Перспективность этих материалов очевидна, поскольку на их основе методами микроэлектроники можно изготавливать запоминающие элементы, полупроводниковые аналоги индуктивности, управляемые светом, магнитным

полем или с другими воздействиями генераторы колебания, без усложнения технологии и конструкции соответствующих устройств.

1. Зарбалиев М. М. Твердые растворы замещения в системе $TlInTe_2 - TlYbTe_2$. Российская АН. Неорганические материалы. 1999, т. 35, № 5, с. 560–564.
2. Алиев Ф. Ф., Агаева У. М., Зарбалиев М. М. Энергетический спектр носителей заряда в твердых растворах $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$. Физика и техника полупроводников, 2016, т. 50, вып. 10, с. 1297–1302.
3. Филинук Н. А. Достижение негатроники и перспективы ее развития. МЭПП-2001, с. 31–33.

Механизм переноса заряда в топологических изоляторах MnBi_2Te_4

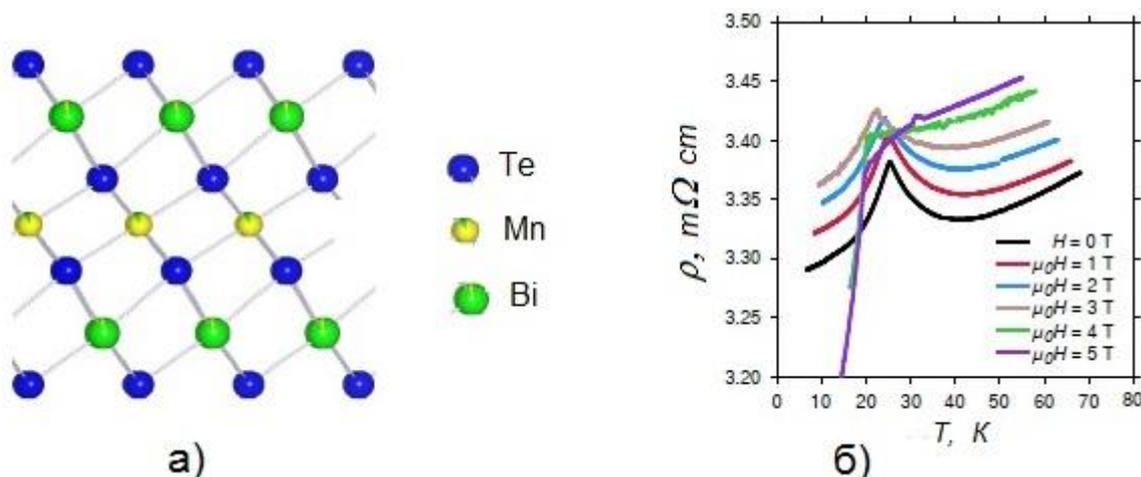
Х. В. Алигулиева^{1, 2}, Н. А. Абдуллаев¹, И. И. Гасанзаде²

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан*

Впервые получены монокристаллы новых антиферромагнитных топологических изоляторов MnBi_2Te_4 . Кристаллы MnBi_2Te_4 кристаллизуются в слоистую структуру с пространственной группой симметрии $R\bar{3}m$. В отличие от слоистых монокристаллов Bi_2Te_3 , слои в MnBi_2Te_4 содержат семь моноатомных плоскостей в последовательности Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te (рис. а). Монокристаллы MnBi_2Te_4 были охарактеризованы методами рентгеновской дифракции и рамановского рассеяния.

Из температурной зависимости удельного сопротивления в плоскости слоёв (рис. б) определена температура фазового перехода парамагнетик – антиферромагнетик (температура Нееля), оказавшаяся равной 25,4 К.



Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития науки при президенте Азербайджанской республики (гранты № EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/04/1 и № EIF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1) и гранта РФФИ № 18-52-06009.

Некоторые особенности взаимодействия агрегатов фуллерена C₇₀ с лазерным лучом

А. В. Арутюнян

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Методами динамического светорассеяния показано, что направленное движение агрегатов фуллерена C₇₀ и, соответственно, доплеровский сдвиг в спектрах рассеяния связаны с давлением света, с увлечением образуемых агрегатов лазерным лучом (He-Ne-лазер, световая мощность около 15 мВт, $\lambda = 633$ нм) и не связаны с нагревом раствора тем же лучом, т. е. с конвекцией (рис. С, D).

Показано «самопроизвольное» возникновение крупных агрегатов фуллерена C₇₀ – диаметром 570–600 нм – в растворе *o*-ксилола с последующим резким ростом их концентрации в течение 2-3-х дней без видимого изменения размера частиц-агрегатов. О последнем свидетельствует постоянство частоты доплеровского сдвига в их спектрах рассеяния за все время наблюдения (рис. А, В).

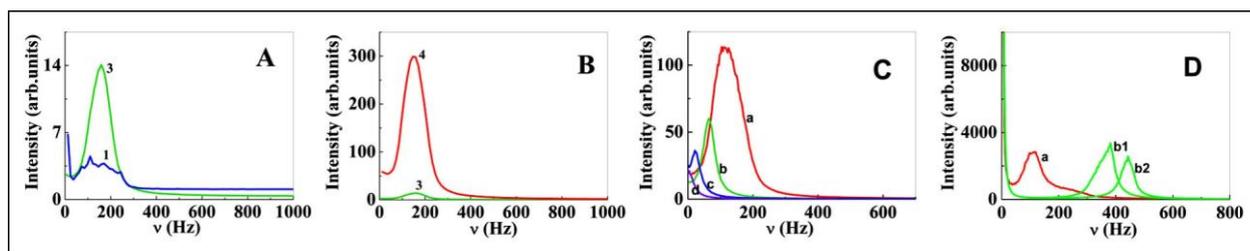


Рис. Спектры рассеянного света образцом фуллерена C₇₀: А – в первый и в третий день наблюдений; В – в третий (повтор из А) и в четвертый день наблюдений; С – спектры с последовательным ослаблением интенсивности входящего в образец луча рассеяния двукратно ослабляющими фильтрами (а – спектр без ослабления луча рассеяния; b – спектр в присутствии двукратно ослабляющего фильтра; с – при 4-кратном ослаблении луча рассеяния; d – при 8-кратном ослаблении луча рассеяния); D – спектры рассеянного света образцом фуллерена C₆₀, угол рассеяния 90° (а – рассеяние происходит от двух встречных, совмещенных лучей одновременно, b1 и b2 – один из встречных лучей рассеяния перекрыт)

1. А. В. Арутюнян, Е. И. Завацкий, В. С. Козлов, М. В. Суясова, Письма в ЖЭТФ, 108, 10 (2018), 706–712; JETP Letters, 108, 10 (2018), 680–685.

Влияние обменно-корреляционного функционала на поверхность Ферми Ni_2MnGa

*Д. Р. Байгутлин¹, В. В. Соколовский^{1,2}, О. Н. Мирошкина¹, М. А. Загребин^{1,3},
В. Д. Бучельников^{1,2}*

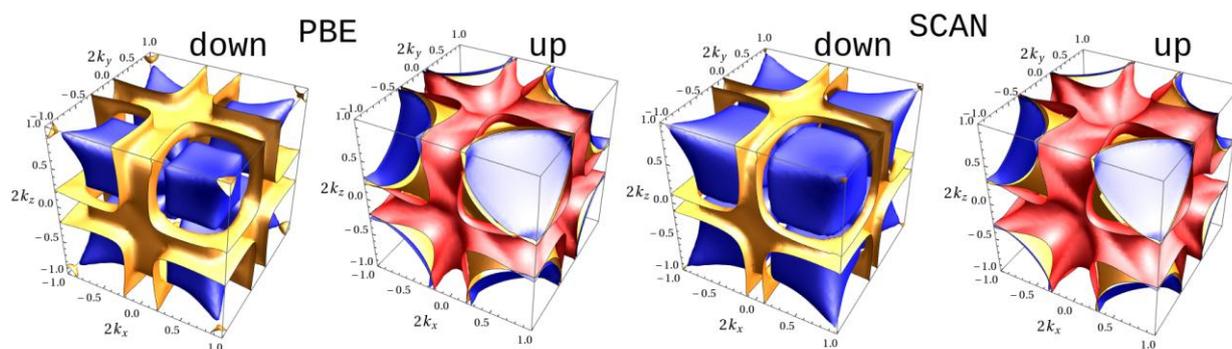
¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия

³ Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

Сплавы Гейслера привлекают значительный интерес благодаря широкому спектру свойств. Например, магнитокалорический эффект, эффект памяти формы, гигантское магнитосопротивление и т. п. [1–3]. Все эти свойства связаны с мартенситными и премартенситными превращениями. Происхождение мартенситного перехода в немодулированную фазу хорошо объясняется эффектом Яна – Тейлора [4]. Однако происхождение предмартенситной фазы 3М и мартенситных модулированных фаз 5М и 7М еще полностью не объяснено. Образование этих фаз связывают с аномалией поперечно-акустической фононной моды TA_2 , происхождение которой, возможно, связано с сильным нестингом поверхности Ферми.

Данная работа посвящена изучению влияния обменно-корреляционного функционала на топологию и вложенность поверхности Ферми Ni_2MnGa .



*Рис. Топология поверхности Ферми
в зависимости от обменно-корреляционного функционала*

На рисунке показана поверхность Ферми для аустенитной фазы в приближениях PBE и SCAN для спин-вверх и спин-вниз каналов. Большое число параллельных частей наблюдается на поверхности Ферми, особенно для спин-вниз полосы обозначенной оранжевым и спин-вверх полосы обозначенной красным. Это указывает на сильный нестинг в исследуемом сплаве.

1. A.N. Vasilev, V.D. Buchelnikov, T. Takagi, V.V. Khovailo, E.I. Estrin, Phys-Usp. 46, 559 (2003).
2. V.D. Buchelnikov, A.N. Vasiliev, V. Koledov, S. Taskaev, V.V. Khovaylo, V.G. Shavrov, Phys-Usp. 49, 871 (2006).
3. P. Entel, V.D. Buchelnikov, V.V. Khovailo, A.T. Zayak, W.A. Adeagbo, M.E. Gruner, H.C. Herper, E.F. Wassermann, J. Phys. D Appl. Phys. 39, 865 (2006).
4. S. Fujii, S. Ishida, S. Asano, J. Phys. Soc. Jpn. 58, 3657 (1989).

Структура и диэлектрические свойства бессвинцовой керамики на основе AgNbO_3

П. А. Безбородова, Ю. А. Лутицкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Соединения, изоморфные структурному типу перовскита, обладают уникальными с научной и практической точек зрения физическими свойствами (сегнетоэлектрическими, магнитными, сверхпроводящими), поэтому интенсивно исследуются в последние десятилетия. К числу таких соединений относятся сравнительно мало изученные серебросодержащие фазы на основе AgNbO_3 , которые могут быть использованы для разработки новых бессвинцовых сегнетокерамических материалов [1], обладающих пироэлектрическими свойствами [2].

Объект исследований – твердый раствор $\text{Ag}_{1-x}\text{Nb}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ со структурой типа перовскита, образующийся в системе $\text{Ag}_2\text{O}-\text{Nb}_2\text{O}_5-\text{WO}_3$ при нагревании на воздухе.

Соединения получали методом твердофазного синтеза. Состав образцов определяли методами дериватографии. Контроль фазового состава проводили с помощью дифрактометра Bruker D8 ADVANCE. Уточнение структурных параметров проводили методом Ритвелда с применением программного комплекса GSAS. Морфологию поверхности синтезированных соединений ниобата серебра и его производных изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа JEOL JSM – 6510. Диэлектрические свойства керамических образцов исследовали в интервале температур от 297 до 897 К двухконтактным методом с помощью измерителя RLC АКТАКОМ АМ-3028.

В докладе обсуждаются вопросы образования и устойчивости фаз в системе $\text{Ag}_2\text{O}-\text{Nb}_2\text{O}_5-\text{WO}_3$, выявления однофазной области существования твердого раствора $\text{Ag}_{1-x}\text{Nb}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ со структурой типа перовскита, микроструктуры поверхности сегнетокерамических образцов и температурно-частотных зависимостей их диэлектрических характеристик.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00269.

1. С. В. Титов, Л. А. Резниченко и др. Неорганические материалы. 45, 334 (2009).
2. Li. Song, Nie Hengchang *et al.* J. Mater. Chem. 4403, 7 (2019).

Исследование заполнения нанопористого мезоструктурированного материала МСМ-41-С1 несмачивающей жидкостью

*А. А. Белогорлов^{1, 2}, Ю. Е. Горшкова³, Г. П. Копица^{4, 5}, А. И. Куклин³,
Д. В. Львов^{2, 6}, П. Г. Мингалев⁷, А. Н. Тюлюсов^{2, 6}*

¹ *Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

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

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

⁴ *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

⁵ *Институт химии силикатов им. И. В. Гребенищикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ, Москва, Россия*

⁷ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

Известно, что заполнение пор несмачивающей жидкостью наблюдается при определённом избыточном давлении (уравнение Лапласа), причём заполняются все поры определённого размера. При снятии избыточного давления несмачивающая жидкость также должна вытечь из всех пор. Следует отметить, что для большинства систем нанопористый материал – несмачивающая жидкость наблюдаются как гистерезис давлений заполнения и вытекания жидкости, так и невытекание жидкости из пор. Поэтому особый интерес представляют эксперименты по исследованию процесса заполнения – вытекания несмачивающей жидкости из пористых материалов.

В настоящей работе исследования были проведены на гидрофобизированном мезоструктурированном материале на основе SiO₂ МСМ-41-С1, имеющим упорядоченную структуру цилиндрических пор. Ранее для данного материала на воде наблюдались оба явления (гистерезис давлений и невытекание несмачивающей жидкости) [1]. Модификация исходного материала МСМ-41 была проведена в лаборатории профессора Г. В. Лисичкина (химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова). Исследования проводились на спектрометре ЮМО реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна). Для этого были разработаны и изготовлены стенд и ячейка высокого давления, позволяющие проводить измерения методом МУРН в диапазоне давлений 1 – 1000 атм. Основной целью эксперимента являлось изучение процесса заполнения пор жидкостью при различных давлениях. Серия экспериментов по МУРН была выполнена с двумя водными концентрациями: тяжелая вода (100%), смесь тяжелой (64%) и легкой (36%) воды, что соответствует «нулевому контрасту» между матрицей SiO₂ и водой в нейтронном эксперименте.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект № 18-13-00398.

1. A.A. Belogorlov, S.A. Bortnikova *et al.* J. Synch. Investig. 11, 425–428 (2017).

Влияние скачка потока на распределение захваченного магнитного поля при импульсном намагничивании монодоменного ВТСП кольца

П. А. Бражник¹, Е. П. Красноперов^{1, 2}

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

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

Методом холловского сканирования измерены распределения захваченных магнитных полей над монодоменным ВТСП кольцом прямоугольного сечения для различных режимов импульсного намагничивания. При малой длительности импульса возникает обрыв экранирующих токов [1], и сканирование обнаруживает сектор кольца с малой величиной остаточного магнитного поля. Этот сектор возникает в результате локального перегрева и нарушения сверхпроводимости. Для импульсов с большой длительностью (более 100 мс) область локального перегрева успевает остыть, и при дальнейшем спадании поля магнитный поток захватывается аналогично процессу охлаждения в магнитного поле (field cooling).

1. Korotkov V.S., Krasnoperov E.P., Kartamyshev A.A. Flux jumps at pulsed field magnetization // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2016. – V. 29. – No. 7. – P. 1893–1896.

**Использование приборной базы ЦКП «Поверхность и новые материалы»
Удмуртского федерального исследовательского центра УрО РАН
для решения задач материаловедения**

Р. Г. Валеев

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

Последние годы уделяется большое внимание развитию возможностей центров коллективного пользования научным оборудованием и активному обновлению их дорогостоящей приборной базы. ЦКП «Поверхность и новые материалы» при УдмФИЦ УрО РАН, обладая высоким приборным и исследовательским потенциалом, также развивает экспериментальную базу и расширяет спектр оказываемых услуг как для внутренних исследований, так и для выполнения заказов сторонних организаций. Наиболее востребованными являются исследования физико-химических свойств и структуры материалов, заказчиками которых являются промышленные предприятия и ВУЗы Удмуртской Республики, а также российские организации (МГУ им. М. В. Ломоносова, ИОНХ РАН, ФИЦ «Кристаллография и фотоника» и др).

Данный доклад представляет наиболее интересные и значимые результаты, полученные с использованием оборудования ЦКП: исследование слоев оксида графена, структур типа М-Хене, оксидов 3d-металлов и др. Представление указанных выше данных призвано увеличить интерес к приборной и исследовательской базе УдмФИЦ УрО РАН.

Работа выполнена при использовании приборной базы ЦКП УдмФИЦ УрО РАН «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН (поддержан Министерством науки и высшего образования РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы, уникальный идентификатор проекта RFMEFI62119X0035).

Магнитотвердые покрытия из наночастиц гексаферрита стронция с высокой степенью ориентации

А. В. Васильев, В. В. Королев, Е. А. Горбачев, А. А. Елисеев

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

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа широко применяются в промышленности, в частности для изготовления постоянных магнитов. На данный момент область использования последних постепенно сужается в связи с заменой на более актуальные аналоги, обладающие лучшими характеристиками. Однако, путем перехода к структурированным композитным материалам на основе наночастиц оказывается возможным добиться значительного улучшения характеристик магнитных материалов на основе гексаферритов. Соответственно, возникает проблема формирования структур, подходящих для создания подобных композитных материалов, в частности покрытий с высокой степенью ориентации частиц. Данная задача может быть успешно решена путем осаждения ориентированных пленок монодоменных частиц из коллоидного раствора.

Таким образом, целью настоящей работы является изучение возможности формирования и свойств получаемых покрытий из коллоидных растворов на основе наночастиц гексаферрита.

Формирование покрытий осуществлялось путем высушивания концентрированной фазы коллоидного раствора в однородном магнитном поле высокой напряженности, ориентированном перпендикулярно подложке. За счет возможности ориентации частиц в растворе внешним магнитным полем [1] достигалась высокая степень упорядочения частиц в формирующейся пленке.

В получаемом покрытии наблюдаются ориентированные нитевидные структуры, аналогичные присутствующим в концентрированной фазе коллоидного раствора. За счет высокой степени ориентации наночастиц в пленке достигается анизотропный отклик на приложение внешнего магнитного поля. Так при перемагничивании покрытия перпендикулярно плоскости подложки соотношение M_r/M_s составляет 0.82, что близко к значениям характерным для ориентированных монослойных пленок гексаферрита [2].

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-33-00765.

1. A.A. Eliseev, A.A. Eliseev, L.A. Trusov, A.P. Chumakov, P. Boesecke, E.O. Anokhin, A.V. Vasiliev, A.E. Sleptsova, E.A. Gorbachev, V.V. Korolev, P.E. Kazin, Appl. Phys. Lett. 113 (2018) 113106.
2. S.E. Kushnir, D.S. Koshkodaev, P.E. Kazin, D.M. Zuev, D.D. Zaytsev, M. Jansen, Adv. Eng. Mater. 16 (2014) 884–888.

«Фантомные» атомы в структуре фуллерена C₆₀

Е. К. Вдовина, И. В. Голосовский

НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В докладе рассматриваются разные подходы для описания кристаллической структуры фуллерена C₆₀. Во-первых, модель так называемого «мероздрического беспорядка» в рамках пространственной группы Fm $\bar{3}$ m с четырьмя молекулами фуллерена в ячейке. Эта модель предполагает сосуществование молекулы фуллерена в двух равновероятных положениях, которые отличаются поворотом на 90° градусов. Возможен другой, альтернативный, безмодельный, подход, предполагающий, что каждая молекула фуллерена является однородной сферической оболочкой из равномерно распределённых атомов углерода.

В рамках первой модели был выполнен профильный анализ дифрактограмм методом Ритвельда. Следуя [1], были выбраны координаты трёх исходных атомов углерода, соответствующие координатам усеченного икосаэдра [2]. Расчет велся в рамках пространственной группы Fm $\bar{3}$ m. Показано, что сходимость можно существенно улучшить если предположить, что какие-то углеродные фрагменты («фантомные» атомы) занимают пустые места (междоузлия) между молекулами C₆₀. Уточнение показывает, что величина избыточной заселенности небольшая, порядка процентов.

Показано, что для хорошей аппроксимации наблюдаемых интегральных интенсивностей рефлексов в модели однородной сферической оболочки также необходимо учесть дополнительную атомную плотность в междоузлиях. Результат воспроизводится как для нейтронографического, так и рентгенографического эксперимента, а также для разных образцов и температур.

Анализ показывает, что наиболее вероятной причиной появления «фантомных» атомов являются атомные тепловые колебания с аномально большой амплитудой. Действительно, профильный анализ дифрактограмм показывает аномально большой тепловой фактор (Дебая – Валлера), что свидетельствует о большой амплитуде колебаний. Уточненный тепловой фактор соответствует среднеквадратичному смещению ~ 0.45 Å. Учитывая тот факт, что размер элементарной ячейки фуллерена C₆₀ – 14.1 Å, а радиус молекулы – 3.5 Å, такие аномально большие атомные колебания углеродных атомов вполне могут быть зарегистрированы в дифракционном эксперименте как «фантомные» атомы.

1. W. David, R. Ibberson, J. Matthewman, K. Prassides, T. Dennis, J. Hare, R. Kroto, R. Talor, D. Walton. Crystal structure and bonding of ordered C₆₀, Nature. 353, 147–149, 1991.
2. P. Heiney. Structure, dynamics and ordering transition of solid C₆₀, J. Phys. Chem. Solids. 53, 1333–1352, 1992.

Особенности формирования структурных и диэлектрических свойств в конденсированных средах на основе магнитоактивных твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$

Д. В. Волков, И. А. Вербенко, Е. В. Глазунова, Л. А. Шилкина

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

В последние годы внимание многих исследователей сосредоточено на группе твердотельных сред, названных мультиферроиками. Манганит висмута (BiMnO_3) – один из представителей этой группы с температурой сегнетоэлектрического фазового перехода (ФП) 750–770 К, а ферромагнитного ФП – 105 К, проявляет магнитодиэлектрический эффект, но весьма слабый из-за большого различия в значениях указанных температур. Для получения керамики BiMnO_3 прибегли к частичному замещению Bi^{3+} на La^{3+} , которое, кроме того, приводит к появлению в этих материалах эффекта колоссального магнетосопротивления.

Таким образом, целью настоящей работы явилось установить влияние модификаторов Fe_2O_3 , CoO , PbO , BaO , на фазообразование, магнитные и диэлектрические свойства керамик твердых растворов (ТР) на основе $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$.

В ходе работы были приготовлены ТР $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{Mn}_{1-y}\text{Z}_y\text{O}_3$ с шагом $x = 0.05$, $y = 0.05$, где Z – модификатор. Для их изготовления использовали соединения La_2O_3 , Bi_2O_3 , Fe_2O_3 , CoO , PbO , BaO , Mn_2O_3 . Все ТР были получены двухстадийным твердофазным синтезом ($T_1 = 800$ °С, $\tau = 10$ ч и $T_2 = 950$ °С, $\tau = 10$ ч). Спекание проводили по обычной керамической технологии ($T_{\text{сп}} = 1020$ °С, $\tau = 2,5$ ч). На каждой стадии технологического процесса проводилась поэтапная оптимизация условий образования ТР.

На основе комплексного анализа фазового состава, результатов рентгеноструктурных и микроструктурных исследований показано, что полученные керамические образцы однофазны, практически беспримесны и имеют высокую экспериментальную плотность, а диэлектрические спектры имеют ряд аномалий, природа которых уточняется. Установлены концентрационные интервалы, в которых ТР сохраняют однофазность, беспримесность.

Электрические и гальваномагнитные эффекты в объёмных монокристаллах и тонких плёнках твёрдых растворов $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0,9}\text{Se}_{0,1})_3$

У. И. Гасанзаде, Х. В. Алигулиева

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

Получены и исследованы стандартным четырёхзондовым методом электропроводность, магнитосопротивление и эффект Холла в объёмных монокристаллах и в тонких плёнках твёрдых растворов $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0,9}\text{Se}_{0,1})_3$.

В отличие от объёмных кристаллов, в тонких плёнках $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0,9}\text{Se}_{0,1})_3$ толщинами 600–800 нм проводимость демонстрирует термоактивационный («диэлектрический») характер, как показано на рис. 1. Анализ экспериментально полученной температурной зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ при температурах ниже 100 К выявил, что в температурном диапазоне 2,5–71 К в тонких плёнках $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0,9}\text{Se}_{0,1})_3$ перенос заряда осуществляется путём прыжков носителей заряда по локализованным состояниям с переменной длиной прыжка (т. н. моттовская проводимость).

$$\rho = \rho_0 \exp(T_0/T)^{1/4}, \quad T_0 = \beta / kg(\mu)a^3,$$

здесь $g(\mu)$ – плотность локализованных состояний на уровне Ферми, a – радиус близких к уровню Ферми локализованных состояний, k – постоянная Больцмана, β – число, зависящее от размерности задачи.

Из полевой зависимости магнитосопротивления (рис. 2) оценен радиус локализации носителей заряда a . Приведены также величины плотности локализованных состояний вблизи уровня Ферми $g(\mu)$ и средняя длина прыжка носителей заряда R .

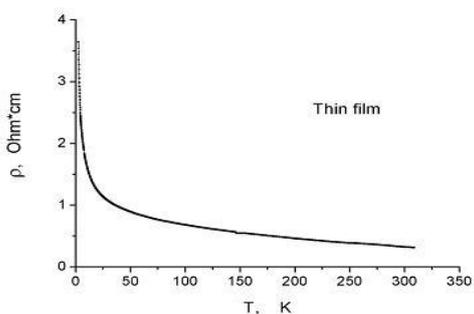


Рис. 1

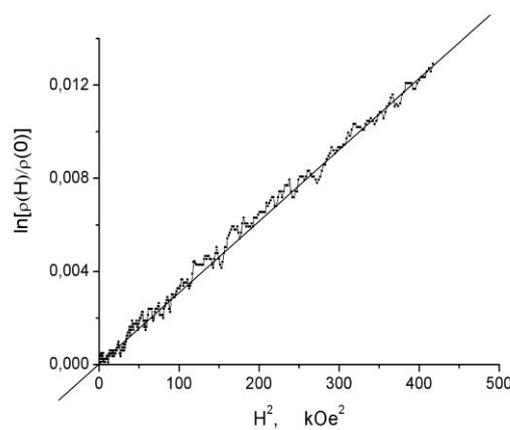


Рис. 2

Гальваномагнитные свойства ультратонких пленок чистого висмута на различных подложках

В. А. Герега

*Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия*

Работа посвящена исследованию гальваномагнитных свойств пленок висмута толщинами 10–50 нм на подложках из слюды и стекла, полученных методом термического вакуумного напыления. Методом атомно-силовой микроскопии исследована структура пленок. Все пленки имеют блочную структуру. Блоки в пленках на стекле имеют округлую форму и меньшие размеры по сравнению с пленками на слюде [1].

Для полученных пленок были исследованы температурные зависимости удельного сопротивления, магнетосопротивления и коэффициента Холла в интервале температур 77–300 К.

Для пленок толщиной 30–50 нм на обоих типах подложек характерны одинаковые возрастающие с понижением температуры зависимости удельного сопротивления [2, 3]. С уменьшением толщины пленок уменьшается угловой коэффициент температурной зависимости. Для пленок толщиной меньше 18 нм при понижении температуры удельное сопротивление уменьшается. Удельное сопротивление пленок на стекле больше по значению. Магнетосопротивление пленок на стекле меньше, чем пленок той же толщины на слюде, и слабо зависит от температуры. Для пленок на слюде характерно наличие максимума на зависимости. Коэффициент Холла всех образцов положителен. Для температурных зависимостей коэффициента Холла характерен максимум, который смещается в область более высоких температур с уменьшением толщины пленки, что указывает на изменение соотношения вкладов электронов и дырок с понижением температуры и уменьшением толщины пленок.

На основе экспериментальных результатов были рассчитаны концентрация и подвижности носителей заряда. Для пленок толщиной меньше 20 нм характерно увеличение концентрации носителей заряда, что отражает изменение энергетической структуры пленок при уменьшении толщины пленок.

1. В. А. Комаров, А. В. Суслов, М. В. Суслов. Физика и техника полупроводников 6 (51), 736 (2017).
2. A.N. Krushelnitskii, V.M. Grabov, V.A. Komarov, E.V. Demidov, N.S. Kablukova. University Scientific Journal 27, 56–68 (2017).
3. В. М. Грабов, Е. В. Демидов, В. А. Комаров. ФТТ 7 (50), 1312–1317 (2008).

Фазообразование и структура твердых растворов на основе соединений типа АВВ₂О₃

Е. В. Глазунова, И. А. Вербенко

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

В настоящее время стремительно развиваются и приобретают все большую актуальность исследования в области многофункциональных интеллектуальных материалов, сочетающих в себе различные виды упорядочения: сегнетоэлектрическое, магнитное, сегнетоэластическое [1]. Однако существуют некоторые ограничения при изучении свойств подобных материалов и их практическом использовании, связанные с существенной зависимостью свойств от термодинамической предыстории (условий получения).

В связи с вышесказанным, актуальным является установление закономерностей формирования структуры, микроструктурных характеристик и свойств в многофункциональных средах на основе мультиферроиков структурой типа АВВ₂О₃ с учетом их кристаллохимических особенностей и условий получения, что и является целью данной работы.

Объектами исследования являлись ТР-системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3-x\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$, где $0.0 \leq x \leq 1.0$, $\Delta x = 0.1$. Образцы были изготовлены путём двухстадийного твердофазного синтеза: $T_1 = 800$ °С, $\tau_1 = 4, 10$ ч, $T_2 = 850-900$ °С, $\tau_2 = 4, 10$ ч и спекания по обычной керамической технологии $T_{\text{сп.}} = 870-1100$ °С, $\tau_1 = 2$ ч.

В работе были проведены рентгенографические, микроструктурные, диэлектрические и магнитодиэлектрические исследования.

В ходе работы были получены беспримесные ТР-системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3-x\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ со структурой типа перовскита. Установлен немонотонный характер изменения объема элементарной ячейки в зависимости от концентрации компонента x , выявлены две области его постоянства $0.0 \leq x \leq 0.2$ и $0.4 \leq x \leq 0.6$. Анализ динамики морфологии микроструктуры позволил установить критическое влияние $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ на кристаллизацию твердых растворов и характер межзеренных границ. Выделены размытые низкочастотные максимумы диэлектрической проницаемости. На основе представлений об упорядочении дефектной подсистемы в соединениях кислородно-октаэдрического типа сделаны предположения о механизмах возникновения обнаруженных явлений.

1. Nikola I. Plić, Jelena D. Bobić, Bojan S. Stojadinović, Adis S. Džunuzović, Mirjana M. Vijatović Petrović, Zorana D. Dohčević-Mitrović, Biljana D. Stojanović // Materials Research Bulletin. 2016. V. 77. P. 60–69.

Формирование электрохимических многослойных структур на несущей основе из анодного оксида алюминия для среднетемпературных твердооксидных топливных элементов

Е. О. Гордеева¹, И. В. Росляков^{1, 2}, Н. В. Лысков³, К. С. Напольский¹

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

² *Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия*

³ *Институт проблем химической физики РАН, Москва, Россия*

Ожидается, что технология твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) в ближайшем будущем станет ключевой на рынке стационарных электрогенераторов. Преимуществами ТОТЭ являются их высокая энергоэффективность и толерантность к различным видам топлива. Для повышения экономической привлекательности ТОТЭ необходимо добиться снижения рабочих температур до 500–700 °С, что возможно путем уменьшения толщины слоя твердого электролита до значений менее 10 мкм. Тонкопленочные ТОТЭ могут быть получены с использованием пористых подложек из анодного оксида алюминия (АОА) в качестве несущей основы.

Целью данной работы является разработка нового класса ТОТЭ на несущей основе из АОА, пригодных к эффективной работе в условиях средних температур (500–700 °С).

Пористые подложки формировали методом анодирования алюминия в 0,1 М Н₃РO₄ при 195 В. Последующий многостадийный отжиг приводит к кристаллизации АОА в фазу корунда и позволяет получить материал, пористая структура которого устойчива при 1500 °С. Диаметр пор D_p равняется 251 ± 22 нм, проницаемость АОА по азоту составляет 1163 ± 45 м³/(м²·атм·ч). На поверхность АОА с помощью магнетронного напыления наносили слой платины толщиной $0,5 \pm 0,1$ мкм, выступающий в качестве электрода.

В качестве твердого электролита в работе использовали оксид циркония, стабилизированный оксидом иттрия (YSZ), который наносили методом центрифугирования из суспензии. Подобранные условия позволяют сформировать однородный слой YSZ толщиной $4,8 \pm 0,2$ мкм на поверхности АОА. Последующий двухстадийный отжиг при 1500/1300 °С приводит к спеканию частиц YSZ и формированию плотного керамического слоя толщиной $2,4 \pm 0,2$ мкм и средним размером кристаллитов $1,5 \pm 0,2$ мкм. Проводимость YSZ при температурах 600–900 °С составляет $1 \cdot 10^{-3} \div 4 \cdot 10^{-2}$ См/см и попадает в диапазон значений, характерных для ТОТЭ.

Таким образом, разрабатываемые ТОТЭ на несущей основе из АОА имеют большие перспективы для практического использования.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-29-11097).

Биметаллические наночастицы в тонких кремнеземных пленках – материалы для каталитических покрытий

Н. Н. Губанова^{1, 2}, О. А. Шилова^{2, 3}, В. А. Матвеев¹, А. Г. Иванова²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Непреходящий интерес исследователей направлен на разработку каталитических слоёв, в том числе для электродов низкотемпературных топливных элементов. Электроды должны быть конкурентоспособными, а их электрофизические и электрохимические свойства соответствовать или превосходить свойства стандартного катализатора E-tek (платиновая чернь/С). В связи с этим целью данной работы являлась разработка альтернативного каталитического материала для электрода ТЭ, представляющего собой ионпроводящую кремнеземную матрицу, с каталитически активными биметаллическими наночастицами различного состава на основе Pt, Pd, Ag, Cu и Ni. В качестве пленкообразователя, формирующего кремнеземную сетку, использовали ТЭОС, легирующими компонентами были биметаллические наночастицы металлов. Для получения каталитического слоя в процессе золь-гель синтеза в качестве носителя каталитических наночастиц металлов вводился углерод. Созревший гель наносился на углеродную бумагу, металлическую сетку или кремниевые подложки. С помощью методов рентгеновской рефлектометрии, рентгенофазового анализа, атомно-силовой микроскопии, оптической, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии была изучена структура полученных пленок, определен фазовый состав и каталитическая активность полученных биметаллических частиц. Получены каталитические слои с уменьшенным содержанием Pt и Pd. При этом значения адсорбционной емкости данных материалов сопоставимо со значениями стандартного каталитического материала E-tek.

Работа выполнена в рамках программы ФНИ № АААА-А19-119022290091-8.

1. Gubanova N.N. Bimetallic Pt/Pd nanoparticles in sol–gel–derived silica films and xerogels / N.N. Gubanova, V.A. Matveev, O.A. Shilova // Journal of Sol-Gel Science and Technology. – 2019. – P. 1–9.

2. Shilova O.A. Processes of film-formation and crystallization in catalytically active ‘spin on glass’ silica films containing Pt and Pd nanoparticles / O.A. Shilova, N.N. Gubanova, V.A. Matveev, A.G. Ivanova, M.Y. Arsentiev, K.E. Pugachev, E.M. Ivankova, I.Yu. Kruchinina // Journal of Molecular Liquids. – 2019. – V. 288, – P. 110996–111008. DOI:10.1016/j.molliq.2019.110996

Микропровода Fe/(PrDy)(FeCo)В на основе RE-TM металлов с управляемыми электрофизическими характеристиками

Е. В. Дворецкая, О. В. Коплак, А. О. Колмаков

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Функциональные свойства микропроводов на основе RE-TM металлов (RE – редкоземельных и TM – переходных) открывают широкий спектр их применения в качестве сенсоров магнитного поля [1–3]. Взаимодействие магнитных, механических и электрических свойств микропроводов можно контролировать с помощью магнитоупругой анизотропии, магнитной доменной структуры, химического, фазового составов и их размеров. Микропровода, созданные методом экстракции висящей капли расплава (PrDy)(FeCo)В, имели аморфную оболочку (PrDy)(FeCo)В и микрокристаллическое ядро α -Fe, демонстрировали магнитную бистабильность. Изображение микропроводов приведены на рис. а, б. Укорочение микропровода от 2 до 0.6 мм приводит к резкому падению коэрцитивной силы (от 120 до 20 Ое) и уменьшению параметра «прямоугольности» петли магнитного гистерезиса в ~ 5 раз [2]. Вольтамперные характеристики микропроводов демонстрировали линейные зависимости. При одинаковом токе I (14 мА), подаваемом на микропровода разного диаметра, величина напряжения увеличивалась от 20 до 90 мВ. Зависимость удельного сопротивления микропровода от площади его поперечного сечения представлена на рис. с.

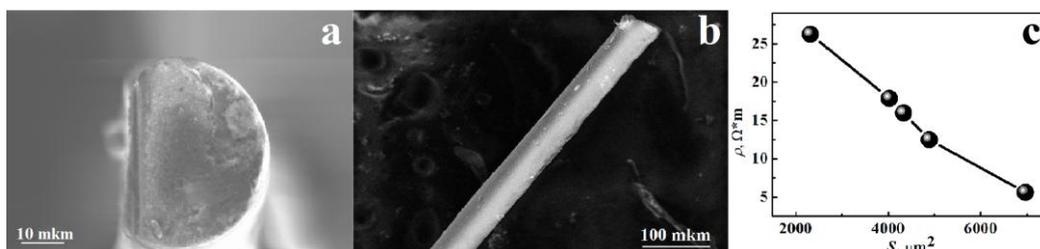


Рис. Оптическая фотография торца (а) и оболочки (б) микропровода; с) зависимость удельного сопротивления микропровода от площади его поперечного сечения

Уменьшение радиуса микропровода приводит к возрастанию удельного сопротивления в нем. Обнаружена корреляция между внутренними напряжениями, большой магнитострикцией, удельным сопротивлением и эффектом бистабильности в Fe/(PrDy)(FeCo)В микропроводах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 20-32-70025 «Стабильность»).

1. R.V. Morgunov *et al.* JMMM, 497 (2020) 166004.
2. О. В. Коплак и др. ФТТ 61 (2019) 2090.
3. О. В. Коплак и др. ФТТ 62 (2020) 562.

Структура дисперсно-упрочненных лент-подложек на основе меди для ВТСП-2

*А. Ю. Дегтяренко, Е. А. Головкова, А. С. Иванов, А. В. Овчаров,
С. В. Крашенинников*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В настоящей работе проведено исследование некоторых особенностей формирования структуры и механических характеристик дисперсно-упрочненной медной ленты в процессе ее изготовления. Исследовано изменение структуры матричной фазы и характеристик упрочняющих дисперсных частиц как после механической деформации, так и в результате рекристаллизационного отжига. Особое внимание уделено возможному влиянию дисперсной фазы на текстуру металлических лент-подложек, поскольку именно совершенная текстура ленты необходима для дальнейшего осуществления роста на ней керамических и сверхпроводящего покрытий. Показано, что легирование медной матрицы частицами железа не ухудшает склонность к образованию высокой кубической текстуры.

Формирование физических свойств $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ методом механоактивации

И. П. Дмитренко¹, К. Г. Абдулвахидов¹, Б. К. Абдулвахидов², М. А. Сирота³,
И. В. Мардасова³, М. А. Витченко³

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

² Дагестанский государственный университет, Дагестан, Россия

³ Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Россия

Физика низкоразмерных структур и наноструктурированных материалов – актуальнейшая и наиболее динамично развивающаяся область современной физики.

Целью данной работы явилось получение твердофазным методом и изучение процессов, происходящих в синтезированных порошках $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ в процессе механоактивации, а также изучение взаимосвязи между структурными параметрами, интенсивными силовыми воздействиями в сочетании со сдвиговой деформацией.

Структура синтезированных образцов $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ была установлена с помощью метода рентгеновской дифракции при комнатной температуре (см.

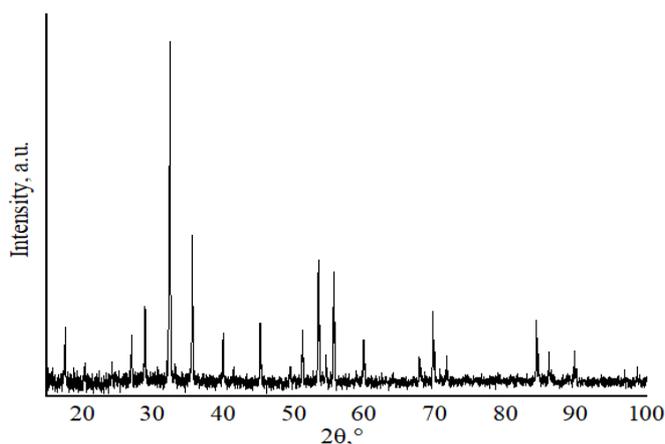


рис). Стартовые образцы $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ характеризуются тетрагональной симметрией с параметрами ячейки: $a = b = 12.349 \text{ \AA}$, $c = 12.351 \text{ \AA}$.

В работе изучены оптические и рентгеновские спектры поглощения, магнитные свойства составов $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ при комнатной температуре и давлениях от 80 до 320 МПа, а также температурная зависимость диэлектрических свойств, обнаружено, что в интервалах давлений 160–250 МПа в процессе механоактивации порошка $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ развиваются рекристаллизационные процессы (деформационная рекристаллизация).

Установлено, что размеры ОКР (областей когерентного рассеяния) и микродеформации $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ немонотонно с ростом давления механоактивации.

Влияние ориентации подложки на магнитокалорический эффект в пленках Gd

Е. В. Дремова¹, О. В. Коплак¹, С. Н. Кашин²

¹ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

² *Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

В последнее время наблюдается всплеск интереса к поиску новых материалов, обладающих большим магнитокалорическим эффектом (МКЭ), особенно в области комнатной температуры. Открытие гигантского МКЭ в соединениях с Gd вызвало интерес к исследованию кристаллических материалов, имеющих данный элемент в своем составе [1]. Для создания холодильных устройств более предпочтительными являются магнитные наноструктурированные материалы. Значительная магнитная анизотропия редкоземельных материалов приводит к большим значениям МКЭ.

Для изучения влияния ориентации подложки на МКЭ нанопленки Gd

толщиной 100 нм напылялись на подложке MgO, имеющие ориентации (111), (110) и (100). Так как главным параметром измерения МКЭ является изменение магнитной части энтропии, то для ее определения проводились измерения на СКВИД магнетометре. Изменение магнитной части энтропии рассчитывали согласно уравнению Максвелла:

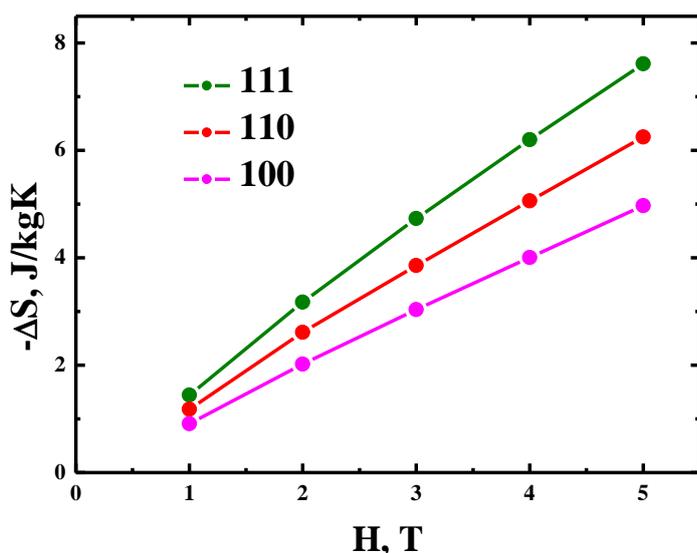


Рис. Полевая зависимость изменения энтропии ΔS вблизи температуры Кюри для разных ориентаций подложки

$$\Delta S_m = \int_0^H \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH$$

Максимальное изменение энтропии наблюдается в области фазового перехода при температуре Кюри 293 К. На рисунке представлены максимальные значения изменения энтропии при разных ориентациях подложки. Ориентация подложки и внутренние механические напряжения дают вклад в изменение энтропии.

1. V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, J. Phys. Rev. Lett., 4494, 78 (1997).

Влияние взаимодействий и неоднородных состояний на магнитные свойства массива железных нанонитей

*И. С. Дубицкий¹, Е. Г. Яшина¹, А. Х. Елмаев²,
С. В. Сотничук³, А. А. Мистонов²*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

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

Плодотворные исследования массивов ферромагнитных нанонитей позволили существенно углубить понимание их магнитных свойств, а также отточить технологии синтеза подобных структур [1]. В то же время значительно расширился диапазон возможных применений данных систем. Однако в последние годы было установлено, что механизмы перемагничивания отдельных нанонитей не описываются простыми моделями, основанными на когерентном вращении намагниченности, а приближение точечных диполей, широко использовавшееся ранее для описания взаимодействия нанонитей, не позволяет воспроизвести кривые гистерезиса даже высокоупорядоченных систем. В самое последнее время были предложены новые аналитические модели поведения намагниченности в нанонитях [2], основанные на представлениях о перемагничивании за счет вихревых или поперечных доменных стенок, однако они еще не прошли верификацию на широком классе систем. Численное микромагнитное моделирование также оказывается ограничено применимым к данным структурам ввиду невозможности проведения расчетов для большого числа нанонитей. Кроме того, модель вихревых доменных стенок предполагает наличие блоховских точек, которые не могут быть рассмотрены в рамках приближения непрерывной среды. Тем не менее, для возможного прикладного использования массивов нанонитей необходима удобная модель, позволяющая предсказывать их магнитные свойства.

В данной работе проведено сравнение аналитических и численных моделей перемагничивания массивов железных нанонитей. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными. Расстояние между нитями было выбрано равным 101 нм, величины диаметров варьировались от 30 до 70 нм. Железо обладает малым значением обменной длины (3.5 нм), что приводит к появлению неоднородных состояний уже в случае нанонитей малого диаметра. Было установлено, что удовлетворительное описание магнитных свойств можно получить уже для модели, включающей 7 нанонитей, рассматриваемых в приближении среднего поля. Выявлены границы применимости аналитических подходов.

Расчеты были проведены с использованием вычислительных ресурсов ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ» (<http://www.cc.spbu.ru/>) и

ЦОД ПИК НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ. Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 18-72-00011.

1. O. Fruchart *et al.* Handbook of Magnetic Materials, 27, 155–267 (2018).
2. S. Bochmann *et al.* Journal of Applied Physics, 124(16), 163907 (2018).

Изменение свойств керамических сцинтилляционных материалов со структурой граната при отклонении состава $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ (GAGG:Ce) от стехиометрического

*В. В. Дубов¹, П. В. Картюк^{1,2}, Е. В. Гордиенко^{1,2}, Д. Е. Кузнецова^{1,2},
П. А. Волков^{1,2}, П. А. Жданов^{1,2}, Г. А. Досовицкий^{1,2}, М. В. Коржик^{2,3}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, Москва, Россия

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

³ Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Беларусь

В настоящее время сцинтилляторы со структурой граната используются для регистрации ионизирующих излучений в различных областях – от компьютерной рентгеновской томографии [1] до гамма-спектроскопии [2] и детектирования нейтронов [3].

В литературе есть ограниченное количество свидетельств, что сцинтилляторы с составами, отклоняющимися от стехиометрического, могут обладать лучшими по сравнению с ними функциональными свойствами. Например, в работе [1] демонстрируется заметное влияние отклонений состава порошков $Gd_{3-x}Ce_x(Al, Ga)_5O_{12}$ в пределах нескольких атомных процентов на послесвечение и яркость радиолуминесценции.

В данной работе мы провели исследование свойств керамики состава $Gd_{2,97}Ce_{0,03}Al_2Ga_3O_{12}$ при избытке или недостатке содержания Gd относительно стехиометрического количества до 5 ат. %. Керамику получали из порошков, синтезированных методом совместного осаждения из азотнокислых растворов с последующей термообработкой при 850 °С; формирование компактов проводили методом одноосного прессования, их спекание осуществляли при температуре 1600 °С в атмосфере воздуха.

Было показано, что вариация состава влияет на интенсивность и кинетику фотолуминесценции, на световой выход и время затухания сцинтилляций керамики, а также приводит к изменению микроструктуры и фазового состава. В докладе будут рассмотрены возможные причины наблюдаемых явлений.

1. T. Kanai, M. Satoh, I. Miura, J. Am. Ceram. Soc. 91, 2 (2008) 456–462.
2. Z. Seeley, N. Cherepy, S. Payne, J. Cryst. Growth, 379 (2013) 79–83.
3. G. Dosovitskiy, P. Karpyuk *et al.*, Radiation Measurements, 126 (2019) 106–133.

Фазовые превращения в FeCo – Fe₂CoO₄/Co₃O₄-наноструктурах при термическом отжиге

А. В. Дудко¹, А. Л. Козловский^{2, 3}

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

² Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, Нур-Султан, Казахстан

³ Казахско-Русский Международный университет, Актобе, Казахстан

В последние годы одним из наиболее перспективных наноматериалов для микроэлектроники и источников питания являются цилиндрические наноструктуры оксидного или шпинельного типа, обладающие большим количеством свободных носителей заряда, развитой активной поверхностью, высокой проводимостью и магнитными характеристиками [1, 2].

В работе представлены результаты исследования фазовых превращений типа FeCo – Fe₂CoO₄/Co₃O₄-spinel при термической обработке в цилиндрических наноструктурах полученных методом шаблонного синтеза путем электрохимического восстановления металлического осадка из растворов электролита. Температура отжига 800 °С в воздушной атмосфере в течение 5 часов. Скорость нагрева 20 °С/мин, остывание в течение 12 часов вместе с печью.

Согласно полученным данным, процесс фазового превращения сопровождается формированием на поверхности наноструктур оксидных наростов, содержащих большое количество кислорода. В случае исходных наноструктур атомное соотношение элементов составило 47 ат. % железа и 53 ат. % кобальта. Для отожженных наноструктур согласно данным результатов картирования образовавшиеся наросты содержат большое содержание кислорода, что подтверждает ранее высказанное предположение об оксидной форме данных образований. Стоит отметить, что отжиг при температуре 800 °С приводит к изотропному окислению структуры нанопроволок по всей длине с образованием оксидных соединений не только на поверхности, но и по всему объему. Согласно данным энергодисперсионного анализа, для отожженных наноструктур соотношение элементов Fe:Co:O составляет 17:31:52 ат. %, что характерно для образования оксидных фаз шпинельного типа.

1. A.L. Kozlovskiy *et al.* Vacuum 153 (2018) 254–261.

2. M.V. Zdorovets *et al.* Materials Research Express 6.7 (2019) 075066.

Организация коллоидных наночастиц гексаферрита в объеме раствора

А. А. Елисеев, А. В. Васильев, Е. А. Горбачев, А. Е. Слепцова

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

Магнитотвердые гексагональные ферриты М-типа 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 с. 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, в том числе ввиду воздействия внешнего магнитного поля.

Таким образом, целью настоящей работы является изучение структурирования и самоорганизации протекающих в коллоидных растворах на основе наночастиц гексаферрита.

Синтез коллоидных растворов осуществлялся в соответствии с ранее разработанной методикой растворения боратной стеклокерамики [1]. Структура раствора была исследована на основании данных малоуглового рентгеновского рассеяния и магнитометрии в постоянных и переменных полях. Установлено образование нитевидных динамических агрегатов в дисперсных системах высокой концентрации со средним расстоянием между наночастицами гексаферрита около 30 нм. Путем варьирования ионной силы и параметров прикладываемого магнитного поля возможно управление межчастичным расстоянием в нитевидном агрегате.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-33-00765.

1. L.A. Trusov, A.V. Vasiliev, M.R. Lukatskaya, D.D. Zaytsev, M. Jansen, P.E. Kazin, Chem. Commun. 50 (2014) 14581–14584.

Магнитные свойства массивов сегментированных нанонитей с разной длиной ферромагнитных сегментов

*А. Елмаев¹, С. В. Сотничук^{1,2}, К. С. Напольский²,
Д. Менцель³, А. А. Мистонов¹*

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

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

³ Институт физики конденсированного состояния, Брауншвайг, Германия

Сегментированные магнитные нанонити, представляющие собой чередующиеся цилиндрические ферромагнитные и диамагнитные участки, радиусом порядка нескольких десятков нанометров, являются перспективными объектами для создания устройств трёхмерного хранения информации [1]. Возможность синтеза высокоупорядоченного массива таких нитей позволяет заметно повысить плотность записи по сравнению с современными носителями, однако магнитостатические взаимодействия между нанонитями часто приводят к усложнению процесса перемагничивания [2].

Для практического применения необходимо, чтобы при перемагничивании одних сегментов другие оставались в прежнем состоянии. Выполнение этого условия требует возможности контроля коэрцитивных сил используемых сегментов. По этой причине, в настоящее время активно изучается влияние таких параметров как длина, диаметр и материал сегментов на магнитное поведение всей системы [3].

В данной работе были исследованы массивы сегментированных нанонитей, синтезированные методом темплатного электроосаждения. В качестве темплатов использовали пористые плёнки анодного оксида алюминия (АОА), полученные с помощью двухстадийного анодирования. Электроосаждение никеля и меди проводили при комнатной температуре в трехэлектродной ячейке. В результате были получены нанонити с повторяющимися участками, содержащими никелевые сегменты длиной от 30 до 1500 нм, разделённые медными вставками длиной 20 нм. Число повторяющихся участков равно 10 для всех типов нитей.

В ходе исследования методом СКВИД-магнитометрии были получены кривые перемагничивания во внешнем магнитном поле, величиной от -20 кЭ до 20 кЭ, приложенном вдоль и поперёк длинной оси нитей. Показано изменение таких параметров как коэрцитивная сила, поле насыщения и квадратичность петли гистерезиса в зависимости от структуры повторяющегося участка нитей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-72-00011).

1. Sergelius Philip *et al.* Nanotechnology, 28, 065709 (2017).
2. Zighem F. *et al.* Journal of Applied Physics, 109(1), 013910 (2011).
3. Wand D.-S. *et al.* Materials, 12(23), 3908 (2019).

Формирование активных центров меди в Cu-MOR в процессе твердофазного ионного обмена

*А. М. Ермакова, В. В. Прядченко, Г. Б. Сухарина, К. Э. Бдоян, В. В. Срабионян,
Т. И. Курзина, В. А. Дурыманов, Л. А. Авакян, Л. А. Бугаев*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Медь содержащие цеолиты типа Cu-MOR с активными центрами из атомов меди, полученные методом твердофазного ионного обмена отличаются высокой активностью (удельным выходом метанола) [1]. Такие центры имеют сложное атомное строение ближнего окружения атомов меди, которое вместе с зарядовым состоянием определяют каталитическую активность цеолита в реакции [2]. Понимание зависимости атомной структуры и зарядового состояния от условий синтеза, а также их взаимосвязи с каталитической активностью является важным этапом при создании высокоэффективных катализаторов для производства метанола из природного газа.

На данном этапе работы выполнено исследование влияния температуры в диапазоне от комнатной (RT) до 400 °С на структуру меди в цеолитах Cu-морденит (Cu-MOR), полученных методом твердофазного ионного обмена. На основе двух взаимодополняющих методик спектроскопии рентгеновского поглощения XANES/EXAFS и теории функционала плотности, определены модели локальной атомной структуры образовавшихся активных центров меди в цеолите Cu-MOR в рассматриваемом диапазоне температур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект мол_a 18-32-00586.

1. S.E. Bozbag, E.M.C. Alayon, Jan Pecháček, Maarten Nachtegaal, Marco Ranocchiari, Jeroen A. van Bokhoven, Catalysis Science and Technology 6(13), P. 5011–5022(2016).
2. E.M.C. Alayon, M. Nachtegaal, A. Bodi, M. Ranocchiari, and J.A. van Bokhoven, Phys. Chem. Chem. Phys., 2015, 17, 7681.

Сверхбыстрое переключение спинов в резонансном режиме

М. Р. Жумаев, М. З. Шарипов, М. Н. Ризокулов

Бухарский инженерно-технологический институт, Бухара, Узбекистан

Спиновая электроника – спинтроника – зарождалась в результате решения фундаментальной и практической проблем миниатюризации, увеличения быстродействия и энергоэффективности электронных устройств. Для достижения этих целей в спинтронике ведётся активная работа для решения следующих важных задач:

- создание материалов и структур с заданными и хорошо контролируруемыми состояниями одиночных спинов или их ансамблей;
- управление отдельными спинами и ансамблями спинов, сочетающее высокую степень пространственной локализации и высокую скорость изменения спиновых состояний.

Следовательно, для этого необходимо создание полупроводниковых, металлических, диэлектрических и гибридных наногетероструктур проявляющее заданные магнитные свойства [1].

В последнее время привлекает большой интерес лазерно – индуцированное сверхбыстрое переключение спинов. Это связано с тем, что умение управлять состоянием отдельно взятого спина или системой спинов служит фундаментальной основой создания и развития спинтроники т. е. спиновой электроники.

В литературе существуют ряд так называемых осциляторных моделей, модифицированные с учетом спин-орбитального спаривания или обменного взаимодействия [2–4].

В нашей работе рассмотрено свойства сверхбыстрого переключения спинов в резонансном режиме. Показано, что благодаря влиянию спин-орбитального спаривания происходит сдвиг частотных резонансов. Кроме того, в резонансном режиме резко возрастают амплитуды прецессии спинов.

1. I.L. Erskine, E.A. Stern, Phys. Rev. B. 8, 1239 (1973).
2. P.C. Lingos, J. Wang, I.E. Perakis, Phys. Rev. B. 91, 195203 (2015).
3. I.Y. Bigot, W. Hubner *et al.*, Ultrafast Mag. I, Springer Proc. In Phys, 159 (2015).
4. C.H. Lambert *et al.*, Science, 345, 1337 (2014)

Электронное строение и оптические свойства эндоэдральных комплексов $C_2Er_2@C_{90}$ на основе изомеров № 21 и 44

А. П. Жуманазаров, А. И. Мурзашев, М. Ю. Кокурин

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Анализ электронных и оптических свойств фуллеренов, выполненный в [1], на примере эндоэдральных комплексов на основе изомеров фуллерена C_{82} показал, что внутриузельное кулоновское взаимодействие (ВУКВ) π -электронов, которое в фуллеренах ~ 10 эВ [2], приводит к коренной перестройке их электронных и оптических свойств. В [1] также указывалось на возможность идентификации различных изомеров фуллеренов на основе анализа из спектров оптического поглощения (СОП). Кроме того, анализ СОП эндоэдральных комплексов в ряде случаев позволяет определить величину переноса заряда от внедренной частицы в остов фуллерена.

Настоящая работа посвящена π -электронные и оптические свойства существенным анализу оптических свойств и определению величины переноса зарядов в эндоэдральных комплексах (ЭК) $C_2Er_2@C_{90}$ на основе изомеров №№ 21 и 44, которые относятся к группе симметрии C_2 . Нами, учетом ВУКВ, были вычислены энергетические спектры и СОП указанных ЭК. В согласии с результатами [1] энергетический спектр указанных систем из-за ВУКВ

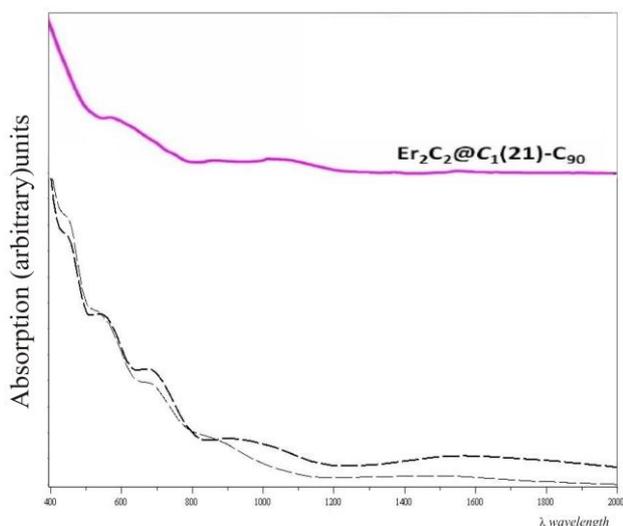


Рис. СОП ЭК на изомере №21 фуллерена C_{90}

разбивается на две группы уровней – хаббардовские подзоны. Верхняя хаббардовская зона – пуста, нижняя полностью заполнена. С учетом такого электронного строения и правил отбора для группы симметрии C_2 , были смоделированы СОП при разных значениях переноса заряда: $-2e$ и $-4e$. Сравнение теоретических и экспериментальных кривых [3] показало их хорошее качественное согласие при величине переноса заряда $-2e$. На рисунке показаны экспериментальная (сверху) и теоретические кривые СОП при разных значениях переноса заряда (жирная линия $-4e$, тонкая – $-2e$). Видно, что хорошее качественное согласие имеет место при переносе заряда $-4e$.

1. И. Е. Кареев, В. П. Бубнов и др. ФТТ 57, 2254 (2015).
2. T.O. Wehling, E. Şaşıoğlu *et al.* Phys. Rev. Lett. 106, 236805 (2011).
3. Shuaifeng Hu, Wangqiang Shen *et al.* Nanoscale, 11, 17319 (2019).

Методики получения кристаллов водорастворимых солей кобальта и никеля

О. Б. Зайнуллин, В. А. Коморников, И. С. Тимаков, Н. Н. Козлова

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

Фильтры с узкой полосой пропускания в УФ диапазоне применяют в приборах «солнечно-слепой технологии» [1]. Данные работы ведутся с использованием двойных сульфатов переходных элементов, так называемых солей Туттона [2]. При этом оптические фильтры, полученные из кристаллов данных веществ, имеют оптическую область пропускания в видимой зоне, что негативно сказывается на технических характеристиках произведенных с их использованием приборов. Настоящая работа посвящена определению условий получения кристаллов водорастворимых солей кобальта и никеля с необходимыми характеристиками.

Выращены кристаллы из насыщенных растворов систем $\text{NiCl}_2\text{-CoCl}_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2\text{-HCl-H}_2\text{O}$, определены области кристаллизации твердых растворов. Также разрабатывается методика получения монокристалла $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Исследованы оптические спектры пропускания растворов данных соединений с близкой к насыщенным растворам концентрацией.

Был спроектирован и изготовлен модифицированный герметичный магнитный узел кристаллизационной установки малого размера. С помощью разработанной установки удалось реализовать рост кристаллов из водно-органических или неводных насыщенных растворов, что позволяет значительно расширить возможности для выращивания кристаллов.

Полученные результаты позволили оптимизировать условия получения кристаллических образцов соединений $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2\cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ni}_x\text{Co}_{(1-x)}\text{Cl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Кристаллические образцы исследованы методами РФА, ДСК/ТГА, определены их спектральные характеристики.

Полученные данные позволяют разработать методики выращивания крупных монокристаллов из водных растворов, пригодных для практического применения.

Работа проведена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. В работе использовано оборудование ЦКП ИК РАН.

1. А. Э. Волошин, Е. Б. Руднева и др. Патент на изобретение RU 2417388 от 24.11.2006.
2. В. Л. Маноменова, Е. Б. Руднева и др. Ж. кристаллография, 2005, 50, 937–942.

Магнитоэластический эффект и параметры тонкой структуры в алюминиевом сплаве Al-Li, состаренном в импульсном магнитном поле

А. А. Звездкина, Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, И. В. Белова

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Методами микротвердости и рентгеноструктурного анализа выполнено экспериментальное исследование влияния импульсного магнитного поля (ИМП) амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой от 1 до 7 Гц на микротвердость и параметры тонкой структуры алюминиевого сплава Al-Li (Al – основа, Mg – 5,10 вес. %, Li – 1,70 вес. %, Zn – 0,50 вес. %), состаренного при времени отжига 4 ч и температуре отжига 120 °С после предварительной закалки от 500 °С (выдержка 1 ч) в воду.

Результаты выполненной работы позволяют сделать следующие выводы:

1. Наложение ИМП приводит к уменьшению значений микротвердости (см. рис.), при этом пластические свойства сплава существенно увеличиваются – т. е. наблюдается «положительный» МПЭ [1, 2], величиной до 39 %.

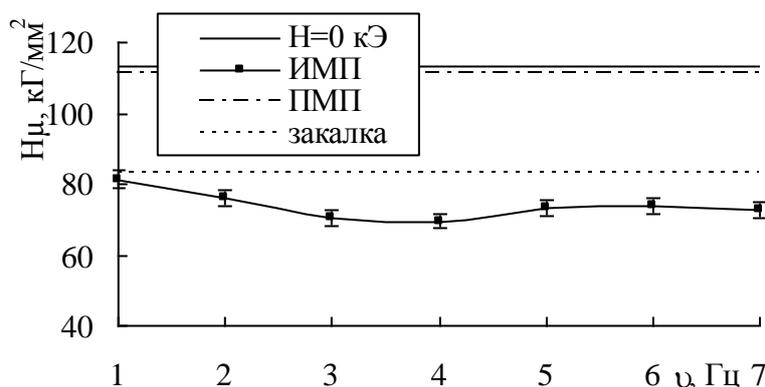


Рис. Зависимость микротвердости алюминиевого сплава Al-Li от времени старения при наложении магнитных полей

2. Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что значения средних размеров блоков когерентного рассеяния при наложении ИМП стали больше по сравнению со значениями при отжиге без поля, а значения величин относительной микродеформации и плотности дислокаций – меньше со значениями при отжиге без поля. Кроме этого, наблюдается корреляциями между частотными зависимостями микротвердости и параметрами тонкой структуры.

1. Р. Б. Моргунов, УФН 174, 131 (2004).

2. A.V. Pokoev, J.V. Osinskaya, Defect and Diffusion Forum 180, 383 (2018).

Влияние переходного пористого слоя кремния на свойства гибридных гетероструктур GaN/SiC/por-Si/Si(111)

Д. С. Золотухин¹, П. В. Середин^{1,2}, Д. Л. Голощанов¹,
А. С. Леньшин¹, А. М. Мизеров³

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Полупроводниковые приборы на основе III-N-соединений представляют особый интерес как для промышленности, так и для исследователей в силу уникальных фундаментальных свойств системы материалов. Высокая теплопроводность, большая ширина запрещенной зоны, температурная, радиационная и химическая стойкость позволяют создавать на основе III-нитридов высокоэффективные силовые и оптоэлектронные приборы, работающие в широком диапазоне допустимых температур, напряжений, токов и длин волн [1, 2]. В данной работе мы демонстрируем один из возможных путей интеграции III-N-технологии с кремниевой с целью получения гибридных гетероструктур III-N/Si. Впервые использован комплексный буферный слой SiC/por-Si/c-Si, изготовленный по уникальной технологии. В ходе сравнительного исследования толстых (~ 1 мкм) GaN-слоев, полученных методом ПА МПЭ на комплексных SiC/por-Si/c-Si- и SiC/c-Si- подложках, показано, что использование por-Si-подслоя позволило на 90 % снизить уровень упругих напряжений в ГС, а также снизить плотность прорастающих дислокаций вертикального направления распространения. Снижение уровня биаксиальных напряжений в слое GaN также подтверждается сдвигом пика люминесценции на 0.03 эВ и снижением деформации кристаллической решетки ϵ_{zz} , измеренной методом РДА. Особо стоит отметить значительное увеличение подвижности носителей заряда до 990 см²/В*с для образца, полученного на SiC/por-Si/c-Si при 52 см²/В*с для образца, полученного на SiC/c-Si при одновременном снижении концентрации носителей заряда с $1.8 \cdot 10^{19}$ см⁻³ до $9.2 \cdot 10^{17}$ см⁻³.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007. Доступ к оборудованию KNMF получен при поддержке гранта президента РФ МД-42.2019.2. We acknowledge the Karlsruhe Nano Micro Facility (KNMF, www.kit.edu/knmf) of the Forschungszentrum Karlsruhe for provision of access to instruments at their laboratories.

1. M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M. Shur editors. Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe. New York: Wiley, 2001.

2. S. Leone, F. Benkhelifa, L. Kirste, C. Manz, R. Quay, O. Ambacher. J. Appl. Phys., 125, 235701 (2019).

Низкотемпературная проводимость в монокристаллах CuGaS_2

Ф. А. Исмаилов, Х. В. Алигулиева

Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

Тройные соединения типа $\text{AIVIII}^{\text{VI}}_2$ ($\text{AI} = \text{Cu, Ag}$; $\text{VIII} = \text{Ga, In}$; $\text{CVI} = \text{S, Se, Te}$) со структурой халькопирита уже длительное время привлекают внимание исследователей в связи с перспективами их практического применения в качестве элементов преобразователей солнечной энергии, нелинейной оптики, эффективных излучающих светодиодов и фотодетекторов. Среди соединений группы $\text{AIVIII}^{\text{VI}}_2$, для фотовольтаических применений наиболее подходящими являются полупроводники CuGaS_2 , поскольку ширина запрещённой зоны равна примерно $E_g \sim 2,43$ эВ и для энергий квантов выше E_g величина коэффициента поглощения в CuGaS_2 очень высока. Методом Бриджмена-Стокбаргера получены монокристаллы CuGaS_2 , проведены рентгено-дифракционные и рамановские исследования. Показано, что при низких температурах проводимость имеет активационный характер: в области 100-300 К доминирует примесная проводимость с энергией активации акцепторов 12 мэВ, а при температурах ниже 10 К – моттовская проводимость, т.н. прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка.

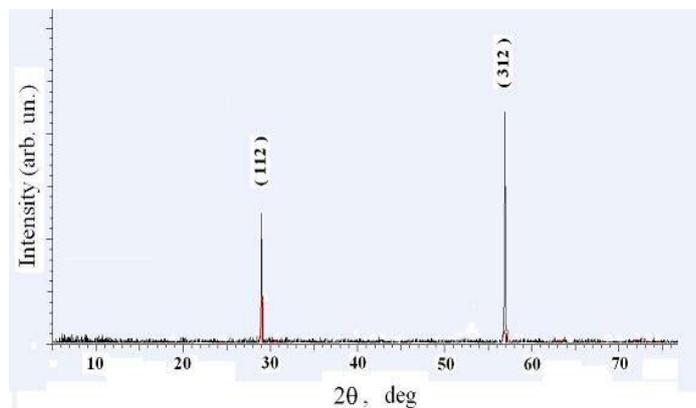


Рис. 1. Дифракция рентгеновских лучей в монокристаллах CuGaS_2

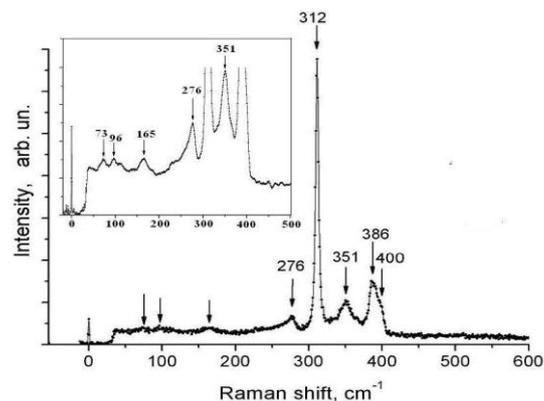


Рис. 2. Кристаллическая решётка CuGaS

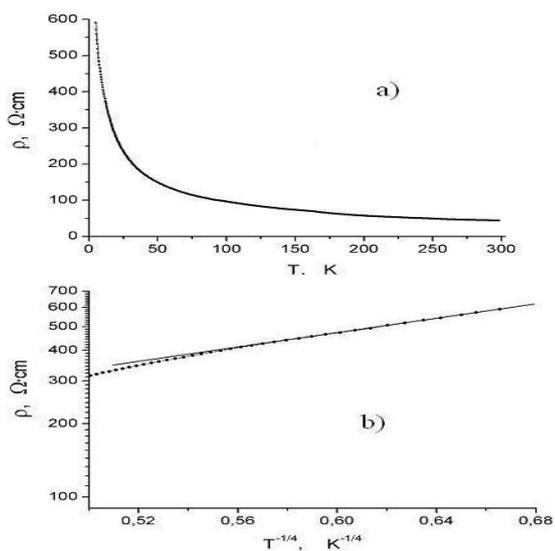


Рис. 3. Спектры комбинационного рассеяния в монокристаллах SiGaS_2 . На вкладке приведены менее интенсивные линии КР-активных фононов

Синтез и свойства наночастиц ферритов NiFe_2O_4 и BiFeO_3

Д. А. Калганов¹, М. С. Грязнова¹, И. В. Яцык², И. В. Бычков^{1, 3}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского, ФИЦ «Казанский научный центр РАН», Казань, Россия

³ Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

Магнитные наночастицы на основе ферритов широко применяются для создания контрастирующих препаратов в магнитно-резонансной томографии и компьютерной томографии, могут быть использованы в качестве основы перспективных таргетных препаратов лучевой терапии и магнитной гипертермии [1]. Поиск новых методов синтеза таких частиц для соединений различного химического состава и кристаллической структуры важен для прикладных и фундаментальных исследований.

В данной работе, с использованием катионного обмена в матрице из сульфированного полистирола, были синтезированы соединения NiFe_2O_4 и BiFeO_3 [2, 3]. Фазовый состав образцов определяли с помощью рентгеновского дифрактометра (ДРОН-3, $\text{CuK}\alpha$), используя стандартную процедуру для поликристаллического порошка. Размер и морфологию частиц оценивали по изображениям сканирующей электронной микроскопии (JEOL JSM-6510). Измерения спектра электронного спинового резонанса были выполнены на спектрометре фирмы Bruker ER 200 SRC (EMX/plus). В приближении теории эффективной среды (формула Бруггемана) были получены данные о диэлектрической и магнитной проницаемости для композитных материалов на основе таких частиц в матрице из живой ткани [4].

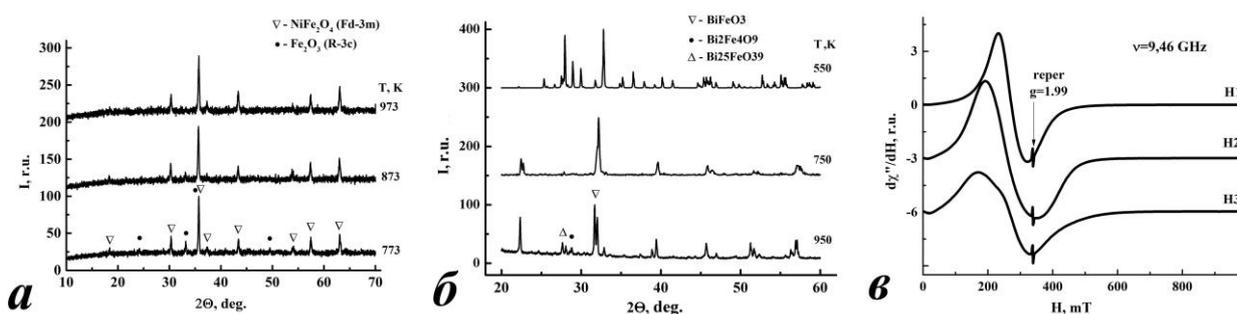


Рис. Рентгеновские дифрактограммы полученных образцов – а и б, спектра электронного спинового резонанса – в

1. A. Rajae, X. Wensheng *et al.* J. Biomed. Nanotechnol. 14, 6 (2018).
2. E.A. Belaya, M.S. Gryaznova *et al.* Butlerov Communications 52, 10 (2017).
3. D.A. Kalganov, M.S. Gryaznova *et al.* Chelyab. Fiz.-Mat. Zh. 4, 4 (2019).
4. C. Gabriel, S. Gabriel *et al.* Phys. Med. Biol. 41, 11 (1996).

Влияние толщины слоя Gd на магнитные свойства тонкопленочных структур

С. Н. Кашин^{1,2}, Е. В. Дремова¹, О. В. Коплак¹

¹ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

² *Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

Изучение магнитных свойств редкоземельного металла Gd обусловлено тем, что Gd переходит в ферромагнитное состояние при температуре близкой к комнатной (температура Кюри равна 293 К), а также тем, что соединения, содержащие Gd, демонстрируют гигантский магнитокалорический эффект [1], что позволяет рассматривать Gd, как материал для изготовления экологически чистых магнитных холодильников нового поколения.

С помощью магнитронного напыления послойно на подложке MgO были выращены структуры, сочетающие буферный слой вольфрама W, толщиной $d = 10$ нм, слой Gd и покровный слой W. Толщина гадолиния варьировалась $d = 100\text{--}300$ нм.

Серия полевых зависимостей $M(H)$ была получена на СКВИД магнитометре при температуре близкой к температуре Кюри ($T_c = 295$ К) для двух образцов разной толщины слоя Gd (рис.).

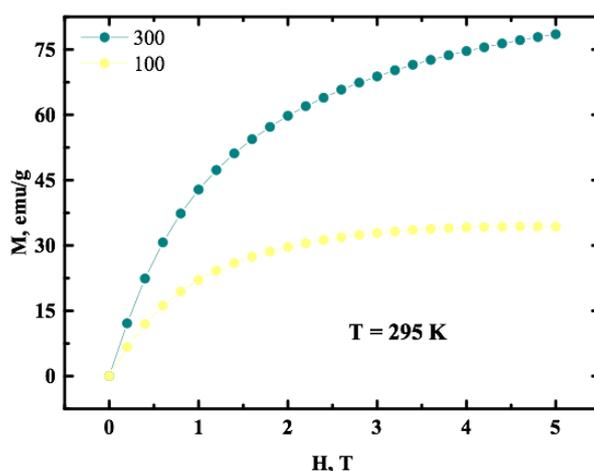


Рис. Изотермические кривые вблизи температуры Кюри для образцов с разной толщиной слоя Gd

Толщина слоя Gd, кроме аддитивной добавки в величину магнитного момента, сильно влияет на вид полевой зависимости. В случае образца с $d = 100$ нм намагниченность насыщения $M_s = 22$ emu/g при 4 Т в контрасте для образца $d = 300$ нм, для которого насыщения не наблюдается. Обсуждается вклад магнитокристаллической анизотропии, анизотропии формы в наблюдаемые эффекты.

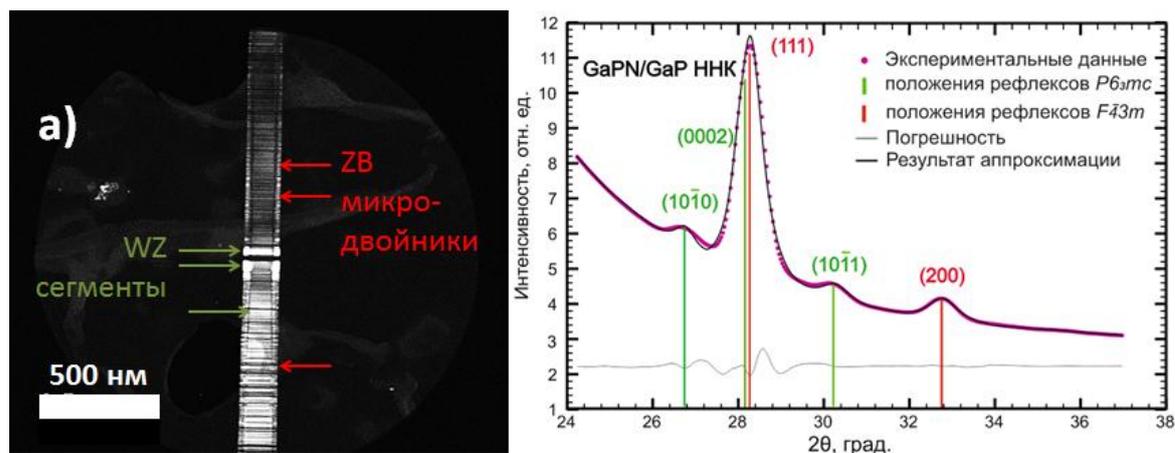
1. V.K. Pecharsky, J. Phys. Rev. Lett., 4494, 78 (1997).

Оптические характеристики и структурные особенности массивов нитевидных нанокристаллов GaPN/GaP

О. Ю. Коваль, И. Е. Елисеев, В. В. Федоров

*Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

На настоящий момент существует проблема создания приборов оптоэлектроники нового поколения, работающих в видимом спектральном диапазоне. III-V полупроводниковые нитевидные нанокристаллы (ННК) на основе азотсодержащих твёрдых растворов GaPN являются перспективной платформой для создания подобных фотовольтаических приборов из-за возможности варьирования ширины запрещенной зоны от 2,2 эВ (300 К) до 1,7 эВ [1, 2]. Благодаря большому аспектному соотношению и развитой поверхности проявляются волноводные свойства и оптические резонансы, что позволяет увеличить как поглощение, так и эмиссию света. Также одномерная геометрия позволяет стабилизировать метастабильные кристаллические модификации.



*Рис. а) ПЭМ-изображение единичного ННК GaPN/GaP;
б) результаты рентгенофазового анализа массивов ННК GaPN/GaP*

В данной работе методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ-ПА N) на подложках Si(111) были выращены массивы самокаталитических гетероструктурированных ННК GaPN/GaP и массивы не содержащих примесей азота ННК GaP в качестве эталона. Было показано, что при внедрении атомов азота в матрицу GaP появляются широкие полосы излучения в районе ~ 600 нм (300 К) [1] и появление дополнительной колебательной моды в районе 386 см^{-1} на спектрах комбинационного рассеяния света (КРС).

С помощью методов КРС-спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции было доказано присутствие метастабильной кристаллической фазы *R63m* GaP (рис.) в виде вставок

различного размера как в GaPN/GaP НК, так и в эталонном образце с приблизительно одинаковой концентрацией.

1. O.Yu. Koval *et al.* CrystEngComm, 22(2), 283–292, 2020.
2. A.D. Bolshakov *et al.* Crystal Growth and Design, 19 (8), 4510–4520, 2019.

Рост и свойства кристалла $(\text{NH}_2)_2\text{CNHCO}(\text{NH}_2)\text{H}_2\text{PO}_3$ (GUNP)

*Н. Н. Козлова¹, А. Э. Волошин¹, В. Л. Маноменова¹, Е. Б. Руднева¹,
Н. И. Сорокина¹, И. А. Ожередов^{2, 3}, А. А. Ангелуц², П. М. Солянкин^{2, 3},
А. П. Шкуринов^{2, 3}*

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова*

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² *Физический факультет и Международный лазерный центр МГУ им. М. В. Ломоносова,
Москва, Россия*

³ *Институт проблем лазерных информационных технологий РАН –
филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, Московская область, Россия*

Одно из наиболее интересных свойств катиона гуанилмочевины (1+) – это проявление так называемой «У-ароматичности», которая стабилизирует молекулу и придает ей почти плоскую конформацию. Планарность вместе с возможностью образования водородных связей позволяет гуанилмочевине (1+) образовывать крепкую слоистую структуру. Однако слоистость подобных структур весьма затрудняет рост объемных кристаллов солей гуанилмочевины, а, следовательно, и дальнейшее исследование их свойств.

При этом интерес к соединениям гуанилмочевины обусловлен тем фактом, что ее соль с фосфористой кислотой $(\text{NH}_2)_2\text{CNHCO}(\text{NH}_2)\text{H}_2\text{PO}_3$ (GUNP) обладает исключительными нелинейно-оптическими (НЛО) свойствами [1]. Помимо существования редких эффектов второй гармоники [2], этот материал был успешно изучен, как перспективный ВКР (вынужденное комбинационное рассеяние) – активный кристалл, проявляющий многочисленные $\chi^{(3)}$ - и $\chi^{(2)}$ -нелинейные оптические взаимодействия [3].

В данной работе представлены результаты исследований температурной зависимости равновесной концентрации GUNP в водных растворах при различных значениях pH, а также изучено влияние pH раствора на особенности роста и габитус монокристаллов. Данные результаты позволили вырастить кристаллы GUNP методом снижения температуры в различных температурных и гидродинамических режимах, обеспечиваемых мешалками разной конфигурации. Методом рентгенофазового анализа проведен контроль фазового состава полученных образцов. Кроме того, серия кристаллов GUNP была выращена методом изотермического испарения растворителя. Проведено сравнение реальной структуры кристаллов, полученных различными методами. Уточнена кристаллическая структура и исследованы нелинейные свойства второго порядка выращенных кристаллов GUNP.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-29-20104).

1. M. Fridrichová, J. Kroupa, I. Němec, I. Císařová, D. Chvostová, Phase Transit.
2. J. Kroupa, Journal of Optics, 12 (2010) 045706.
3. А.А. Каминский, Р. Becker, Н. Rhee, О. Lux, А. Kaltenbach, Н. J. Eichler, А. Shirakawa.

Исследование структурных характеристик керамик $L_xS_{1-x}T$

А. Л. Козловский^{1, 2}

¹ Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК, Нур-Султан, Казахстан

² Казахско-Русский Международный университет, Актобе, Казахстан

Одними из наиболее перспективных материалов среди перовскитных или перовскитоподобных керамик являются структуры типа АВО₃ характерные для титанатов бария, стронция или кальция [1–3]. Интерес к данному классу керамик обусловлен их сегнетоэлектрическими свойствами, устойчивостью к внешним воздействиям, а также развитой удельной поверхностью, которая делает их наиболее подходящими материалами для микроэлектронных устройств, катализаторов, основы для источников сохранения энергии и т. д.

Работа посвящена изучению влияния допирования литием на структурные сегнетоэлектрических керамик $Li_xSr_{1-x}TiO_3$. Синтез керамик типа $Li_xSr_{1-x}TiO_3$ (LST) с различным содержанием лития в структуре проводился с применением метода твердофазного синтеза с последующим термическим отжигом в кислородной среде при температуре 800 °С в течение 4 часов, скорость набора температуры 15 °С/мин. Концентрация допанта лития варьировалась от $x = 0.01$ до 0.15.

В случае допирования литием с малой концентрацией $x = 0.01–0.05$, фазовый состав исследуемых керамик представляет собой смесь трех фаз $SrTiO_3$, TiO_2 и новой фазы орторомбической фазы $Li_2Ti_3O_7$, характерной для образования твердого раствора внедрения или замещения атомами лития атомов титана или стронция с образованием новой фазы. При этом дальнейшее увеличение концентрации допанта приводит к формированию двухфазной структуры, состоящей из смеси фаз $SrTiO_3$ и $Li_2Ti_3O_7$.

Установлено, что увеличение лития в процессе синтеза приводит к фазовым превращениям типа $SrTiO_3/TiO_2 \rightarrow SrTiO_3/TiO_2/Li_2Ti_3O_7 \rightarrow SrTiO_3/Li_2Ti_3O_7$.

1. A.L. Kozlovskiy *et al.*, *Ceramics International* 45(14) (2019) 17236–17242.
2. A.L. Kozlovskiy, I. Kenzhina, M. Zdorovets, *Ceramics International* 45.7 (2019) 8669–8676.
3. M.V. Zdorovets and A.L. Kozlovskiy, *Vacuum* 168 (2019) 108838.

Угловые зависимости магнитного момента микропроводов α -Fe/(PrDy)(FeCoB)

*А. О. Колмаков¹, Е. В. Дворецкая¹, Д. В. Королев², Р. А. Валеев²,
В. П. Пискорский², А. С. Денисова³, Р. Б. Моргунов^{1, 3}, О. В. Коплак¹*

¹ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

² *Всероссийский институт авиационных материалов, Москва, Россия*

³ *Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова,
Москва, Россия*

Новый тип микропроводов на основе переходных и редкоземельных металлов, сочетающих ядро α -Fe и оболочку PrDy-FeCo-B, демонстрируют резкое перемагничивание в магнитном поле $H_S \sim 100$ -200 Ое при ориентации микропровода вдоль магнитного поля [1,2]. При перпендикулярной ориентации насыщение магнитного момента достигается в значительно большем поле эффективной анизотропии $H_{shell} \sim 10$ кОе. Разделены вклады ядра и оболочки в перемагничивание микропроводов в магнитном поле 1–10 кОе (рис.). В поле

10 кОе амплитуда вклада ядра в ~ 15 раз меньше амплитуды вклада оболочки.

Вклад ядра в полевую зависимость магнитного момента при перпендикулярной ориентации магнитного поля мал и перестает иметь значение при $H > 300$ –400 Ое. Намагниченность ядра микропровода M_{core} направлена вдоль его оси и уменьшается, как $\cos\phi$ с ростом угла, где ϕ – угол между микропроводом и магнитным полем. Проекция намагниченности оболочки

M_{shell} , напротив, растет с увеличением угла ϕ .

Определен угол $\theta = 170^\circ$

наклона намагниченности оболочки по отношению к намагниченности ядра $\theta = 0^\circ$. Установлено, что поле рассеяния ядра намагничивает аморфную оболочку в направлении силовых линий поля рассеяния, однако имеется небольшая перпендикулярная компонента.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 20-32-70025 «Стабильность»).

1. R.V. Morgunov *et al.* JMMM, 497 (2020) 166004.

2. О. В. Коплак и др. ФТТ 62 (2020) 562.

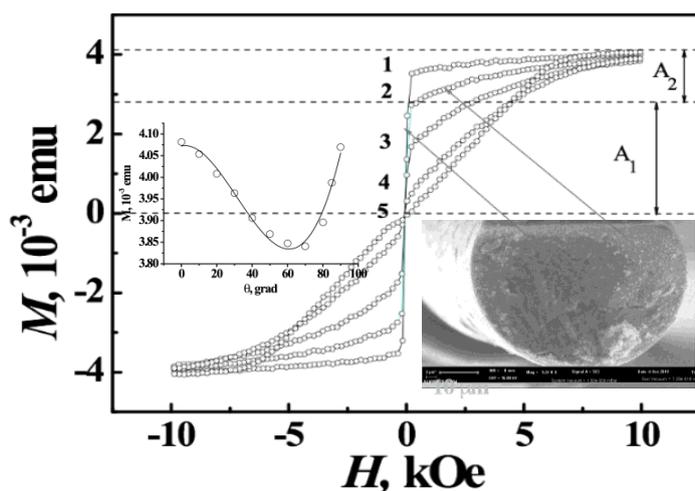


Рис. Угловые зависимости магнитного момента микропровода при ориентации магнитного поля 0° (1), 30° (2), 45° (3), 60° (4) и 90° (5) вдоль оси микропровода

Кристаллы-суперпротоны: способы получения и использование в качестве материалов протонообменных мембран

*В. А. Коморников, И. С. Тимаков, О. Б. Зайнуллин, В. В. Гребенев,
И. П. Макарова, Е. В. Селезнева*

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

Перспективными для разработки топливных элементов на водороде (водородная энергетика) материалами являются соединения семейства с общей формулой $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ ($M=K, Rb, Cs, NH_4$; $XO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4$). Одним из уникальных свойств кристаллов этого семейства, названного суперпротоны, является аномально высокая протонная проводимость при относительно невысокой температуре, проявляющаяся в следствие фазового перехода. Причем суперпротонная проводимость в них связана только со структурными особенностями данных соединений и не зависит от влажности, дефектов реальной структуры или влияния легирующих добавок.

Технологически важным является вопрос о получении и исследовании новых кристаллов, структурной обусловленности их уникальных свойств, возможности расширения температурного диапазона существования суперпротонной фазы.

Для получения новых соединений семейства $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ были изучены фазовые равновесия в водно-солевых многокомпонентных системах $K_2SO_4-(NH_4)_2SO_4-H_2SO_4-H_2O$ и $CsHSO_4-CsH_2PO_4-NH_4H_2PO_4-H_2O$. Были определены области кристаллизации и условия воспроизводимого получения ряда кристаллов: $(K, NH_4)_3H(SO_4)_2$, $(K, NH_4)_9H_7(SO_4)_8 \cdot 0.5H_2O$, $(K, NH_4)HSO_4$, и впервые получены соединения $NH_4Cs_3(HSO_4)_3(H_2PO_4)$, $NH_4Cs(HSO_4)(H_2PO_4)$ и твердые растворы на основе этих фаз.

На примере соединений этого же класса кристаллов-суперпротоны составов $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$ и $Cs_6(HSO_4)_3(H_2PO_4)_4$ была отработана методика препаративного синтеза композитных материалов с использованием алюмофосфатного армирующего компонента.

Работа выполнена при поддержке Гранта 18-32-20050. Характеризация физико-химических свойств кристаллов проведена при Министерстве науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. В работе использовано оборудование ЦКП ИК РАН.

**Гибкие мембраны *n*-/*p*-GaP нитевидных нанокристаллов
в матрице модифицированных силоксанов с прозрачным электродом
из одностенных углеродных нанотрубок**

Ф. М. Кочетков¹, В. В. Неплох¹, В. В. Федоров¹, А. Д. Большаков¹, Г. Э. Цырлин¹,
Р. М. Исламова², И. С. Мухин¹

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет им. Ж. И. Алферова РАН, Санкт-Петербург, Россия
² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Привлекательные свойства органических светоизлучающих диодов (OLED), такие как относительно простое и недорогое изготовление, а также достаточно эффективная электролюминесценция (EL) позволили отрасли на основе OLED завоевать рынок. Однако органические материалы отстают от неорганических материалов по стабильности и внешней квантовой эффективности EL в оптическом диапазоне. Технологию тонких пленок неорганических материалов трудно адаптировать для небольших экранов с высоким разрешением из-за необходимости применения сложных постростовых методов. Изготовление гибких устройств на основе тонких пленок накладывает еще большие сложности, т. е. сверхтонкую эпитаксию на подложках или высвобождение синтезированного материала с подложек.

В данной работе предложены новые химические и механические материалы и технологии для создания мембран на основе массивов полупроводниковых АЗВ5 нитевидных нанокристаллов (NW) в матрице силиконовых полимеров и изготовления оптоэлектронных устройств. Синтезированные молекулярно-пучковой эпитаксией *n*-, *p*- и *i*-GaP NW были методом центрифугирования инкапсулированы в модифицированный винильными группами полидиметилсилоксан и отделены от ростовой подложки. К полученным мембранам были созданы электроды из различных материалов, включая одностенные углеродные нанотрубки, ферроценилсодержащий полиметилгидросилоксан с добавлением многостенных углеродных нанотрубок и без них. Электрический контакт мембран был проверен методом спектроскопии тока, наведенного электронным лучом (EBIC). Разработанные методы и материалы могут быть использованы для создания высококачественных гибких неорганических оптоэлектронных устройств.

Закономерности роста кристаллов антрацена в условиях парового физического транспорта

А. А. Кулишов, В. А. Постников

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

Монокристаллы органических люминофоров востребованы как эффективные сцинтилляторы для физики высоких энергий. Рост органических монокристаллов методом парового физического транспорта (ПФТ) ещё сравнительно мало изучен, однако представляет интерес с точки зрения получения качественных образцов с низким содержанием примесей с одной стороны и высокой эффективности относительно экономии вещества с другой. Данная работа посвящена исследованиям закономерностей роста кристаллов антрацена в ПФТ.

Исследовано влияние температуры на особенности роста кристаллов (морфологическое качество и линейные размеры). По данным о потери массы источника вещества определена зависимость давления насыщенных паров антрацена в инертной атмосфере азота ($P_0 = 1,0$ атм.) в зависимости от температуры. Получены экспериментальные сведения по поверхностной плотности центров кристаллизации в зоне роста кристаллов. На основании экспериментальных данных проанализированы кинетические и термодинамические параметры зародышеобразования и роста кристаллов. Для выращивания крупных кристаллических образцов антрацена с качественной морфологией установлены оптимальные температурные режимы для источника вещества и зоны кристаллизации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90145.

Управление оптическими свойствами гиперболических метаматериалов на основе массивов металлических наностержней

*А. П. Леонтьев, О. Ю. Волкова, И. А. Колмычек, В. Б. Новиков, А. В. Венец,
А. Р. Помозов, Т. В. Мурзина, К. С. Напольский*

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

Актуальной задачей современного материаловедения является создание материалов, пригодных для управления электромагнитным излучением. Для оптического диапазона перспективно применение массивов металлических наностержней в диэлектрической матрице. Наиболее часто для их получения применяют метод темплатного электроосаждения с использованием в качестве матриц пористого анодного оксида алюминия (АОА). Получаемые нанокомпозиты обладают гиперболическим законом дисперсии и перспективны для применения в нанофотонике, системах обработки, передачи и хранения информации.

В настоящей работе осаждение Au наностержней проводили из электролита, содержащего 10 г/л $\text{Au}[\text{CN}]_2^-$ в цитратном буфере, при потенциале -1 В относительно Ag/AgCl электрода сравнения. Длину наностержней задавали путём ограничения заряда, затрачиваемого на осаждение.

В спектрах пропускания Au@АОА нанокомпозитов наблюдается два минимума, которые соответствуют резонансному возбуждению электронного газа поперек и вдоль наностержней и, согласно расчётам, совпадают с точками полюса (epsilon-near-pole, ENP) и близкой к нулю диэлектрической проницаемости (epsilon-near-zero, ENZ). Эффективным способом изменения положения ENZ является уменьшение объёмной доли металла, что было реализовано с помощью контролируемого блокирования части каналов матрицы. Длина наностержней слабо влияет на положение ENZ.

Показано, что при напылении плёнки Ni толщиной 15 нм на поверхность нанокомпозита Au@АОА появляется возможность управления оптическими свойствами образцов внешним магнитным полем. Величина магнитоиндуцированного поворота плоскости поляризации в плёнке Ni увеличивается гиперболическим метаматериалом более чем на два порядка, что обусловлено большой разницей показателей преломления и коэффициентов поглощения обыкновенной и необыкновенной волн в области ENZ. Таким образом, нанокомпозиты Ni/Au@АОА могут быть использованы как магнитоуправляемый конвертер и вращатель поляризации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 18-73-10151.

**Временная зависимость микротвердости, параметра решетки,
параметров тонкой структуры и фазообразования
в алюминиевом сплаве АК9 при наложении постоянного
и импульсного магнитных полей**

С. Г. Магамедова, Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, Д. А. Кдур

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

В данной работе представлены результаты комплексного экспериментального исследования влияния времени отжига от 2 до 8 ч на микротвердость, параметр решетки, средний размер блоков когерентного рассеяния, плотность дислокаций, относительную величину микродеформаций и процесс фазообразования в алюминиевом сплаве АК9 при наложении постоянного магнитного поля (ПМП) и импульсного магнитного поля (ИМП). Образцы из сплава АК9 после закалки с 535 °С (выдержки 2 ч) в воду 20 °С старили при температуре 175 °С в ПМП напряженностью 7 кЭ и ИМП амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой 2 Гц.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

1. При наложении ПМП наблюдается так называемый «положительный» магнитоэластический эффект (МПЭ) [1, 2], приводящий к уменьшению микротвердости до 25 %, при этом пластические свойства сплава возрастают.

2. В тоже время, наложение ИМП на старение сплава также всегда приводит к уменьшению микротвердости до 31 %. По-прежнему, наблюдается «положительный» МПЭ, но значительно большей величины.

3. Методом рентгенофазового анализа установлено, что наложение ПМП и ИМП на старение алюминиевого сплава АК9 приводит к увеличению интенсивности всех наблюдаемых линий до 10 раз (линий α -твердого раствора на основе алюминия, фазы Mg_2Si и чистого кремния) и уменьшению их полуширины по сравнению с отжигом без наложения поля, что свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры сплава.

4. Обнаружена корреляция между временными зависимостями микротвердости, параметра решетки и параметрами тонкой структуры: при наложении ПМП и ИМП значения микротвердости, параметров решетки, плотности дислокаций и относительной величины микродеформации меньше, чем без поля, а средний размер блоков когерентного рассеяния – больше, чем без поля.

1. Ю. И. Головин, Физика твердого тела, 769, 46 (2004).

2. A.V. Pokoev, J.V. Osinskaya, Defect and Diffusion Forum 180, 383 (2018).

Исследование магнитных свойств монокристалла $GdVO_4$ методом ЭПР

Д. В. Мамедов, И. В. Яцык, Р. М. Ерёмкина

*Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского,
ФИЦ «Казанский научный центр РАН», Казань, Россия*

Соединения RVO_4 , где R – редкоземельный элемент, имеют большое практическое применение благодаря проявляемому ими разнообразию функциональных свойств. Потенциально они могут быть использованы в качестве сцинтилляторов, термофосфоров, фотокатализаторов и катодолюминесцентных материалов [1].

Нами методом ЭПР был исследован монокристалл $GdVO_4$. Монокристалл $GdVO_4$ имеет тетрагональную симметрию $I4_1/amd$; точечная группа $Gd^{3+} \bar{4}m2$ [2]. Температурные зависимости спектров ЭПР приведены на рис. а. В спектре ЭПР наблюдается одна обменно-суженная линия. Из анализа формы линии ЭПР в трёх взаимно перпендикулярных кристаллографических плоскостях были получены угловые зависимости ширины линии ЭПР при температуре 300 К, которые представлены на рис. б.

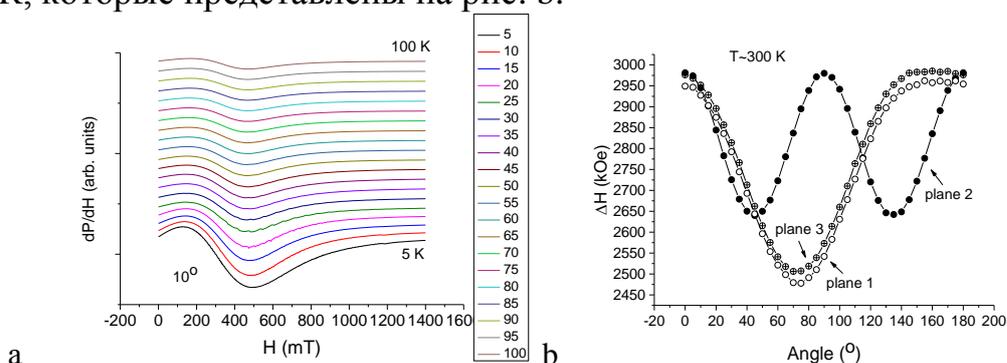


Рис. (а) Угловые зависимости спектров ЭПР $GdVO_4$;
(б) температурные зависимости спектров ЭПР $GdVO_4$

Теоретически ширина линии спектра ЭПР лоренцевой формы аппроксимируется выражением: $\Delta H = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{M_2^2}{M_4} \right)^{1/2}$, где M_2 и M_4 – второй и четвёртый моменты линии ЭПР соответственно [3]. $M_2 = \frac{\langle [H_{an} S^+] [S^-, H_{an}] \rangle}{h^2 (S^+ S^-)}$, $M_4 = \frac{\langle [H_{ex} [H_{an} S^+]] [S^-, H_{an}] H_{ex} \rangle}{h^4 (S^+ S^-)}$, где H_{ex} – гамильтониан изотропного обменного взаимодействия, а H_{an} – гамильтониан анизотропных обменных взаимодействий. Был проведён анализ угловой зависимости ширины линии ЭПР в $GdVO_4$ с учётом H_d – диполь-дипольного взаимодействия между ионами гадолия и H_{cf} – одноионной анизотропии, обусловленной влиянием кристаллического поля тетрагональной симметрии.

1. D. Erradonea, A.D. Garg., Progress Mat. Science. 97, 123 (2018).
2. D.F. Mullica, E.L. Sappenfield *et al.*, Inorganica Chimica Acta. 248, 85 (1996).
3. С. А. Альтшуллер, Б. М. Козырев, Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп. М.: Наука (1972).

Электрическая усталость в многокомпонентных керамиках PZT-PZN-PMN, модифицированных Ba и Sr

М. О. Мойса, И. Н. Андриюшина, К. П. Андриюшин

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

Многокомпонентные сегнетопъезоэлектрические материалы на основе PZT ($\text{PbZrO}_3\text{-PbTiO}_3$) широко применяются в современном приборостроении (микро-, наноэлектроника, атомная энергетика, медицинская и космическая техники, и др.). Ввиду того что такие приборы практически всегда работают в циклических режимах (переменные температуры, давления, частоты переменного электрического поля и т. д.), требуется информация о их деградационных свойствах (электрических или механических) в режиме нагрузки. Так как последние (миграционные дефекты, микротрещины, расслаивание электродов и пр.) вызывают снижение рабочих характеристик, а в крайнем случае нарушение целостности изделия, требуется учитывать данное обстоятельство при разработке устройств. Таким образом, целью настоящей работы явилось установление влияния электрической усталости поляризационных свойств, а именно поляризации насыщения (P_s), остаточной (P_r) и коэрцитивных полей (E_c), в многокомпонентных твердых растворах (ТР) в условиях циклически изменяющегося переменного электрического поля (n -количество циклов, $n \approx 0 \div 5 \times 10^6$) напряженностью выше E_c каждого конкретного объекта. В качестве объектов исследования выступили ТР системы PZT-PZN-PMN, модифицированные Ba и Sr [1]. Установлено, что все исследованные объекты в диапазоне $n \approx 0 \div 10^4$ характеризуются постоянством анализируемых параметров. В интервале от 10^4 до 10^5 наблюдается незначительное возрастание E_c сопровождающееся снижением P_s , P_r . Дальнейшее увеличение количества циклов ($n > 5.5 \times 10^5$) приводит к ускорению роста E_c и снижению P_s , P_r примерно вдвое. Наблюдаемая картина при электрической усталости, вероятно, связана с развитием дефектной ситуации в исследованных ТР. Полученные данные необходимо учитывать при разработке низкочастотных устройств (гидрофонов, микрофонов, сейсмоприемников и др.) на основе подобных сред.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00552 мол_а.

1. K.P. Andryushin, L.A. Shilkina *et al.* *Ceramics International*. 45, 14 (2019).

Потеря атомов S куперитом

Н. В. Мудровская, В. И. Рождествина

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, Благовещенск, Россия

Комплекс исследований, выполненных на монокристаллах куперита Юнско-Даньского золотоносного узла Приохотской платиноносной провинции Маймаканской зоны Дальнего Востока [1], выявил ряд особенностей в их тонком строении. Вероятно, реальная структура PtS менее симметрична, чем первоначально определенная. Следовательно, необходимы детальные структурные исследования с применением современных прецизионных методов анализа.

Для установления степени кристалличности и выявления структурных дефектов кристаллы куперита изучены методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения.

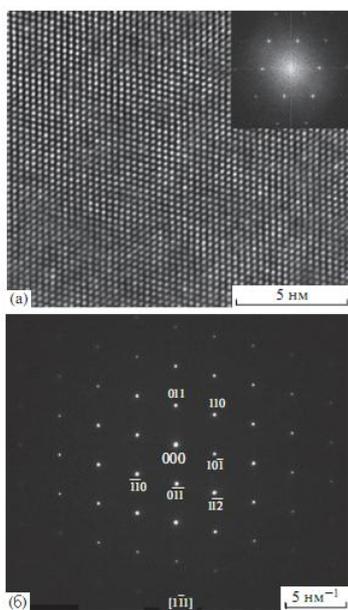


Рис. (а) - ПЭМ изображение высокого разрешения кристалла куперита (на вставке - фурье-преобразование исследованной области кристалла) и (б) - картина электронной дифракции в кристалле куперита

Анализ электронно-микроскопического изображения высокого разрешения и его фурье-преобразования (рис. а) показывает, что кристаллическая структура куперита характеризуется высокой степенью порядка. Геометрический анализ изображения не выявил в пределах полей видимости структурных дефектов в укладке атомов Pt всех масштабных уровней (точечных, линейных, объемных). Пятна на картине электронной дифракции (рис. б) проиндексированы в тетрагональной решетке. Дифракционные пятна локальные, сверхструктурные рефлексy не выявлены. Определены межплоскостные расстояния $d_{101}=0.304$, $d_{011}=0.308$, $d_{110}=0.248$, $d_{112}=0.196$ нм. Имеет место незначительная деформация – $d_{101} \neq d_{011}$. На электронно-микроскопических снимках видна укладка атомов Pt в плоскости (111). При действии сфокусированного ионного пучка на образец

происходит потеря атомов S. Рентгеноспектральный анализ пластин, подвергнутых ионной бомбардировке, показал, что содержание S уменьшилось до 5.09 мас. % и по химическому составу образец стал соответствовать Pt₃S.

Процесс потери серы куперитом имеет место и в природных условиях. Установлена серия образцов, сохраняющих морфоструктурные особенности куперита, но представляющие собой смесь самородной платины и ее сульфидов с непостоянным химическим составом.

1. В. И. Рождествина, А. В. Иванов, М. А. Заремба и др., Кристаллография. 423, Т. 53. № 3 (2008).

Моно- и биметаллические наночастицы на основе серебра, платины и палладия как катализаторы для топливных элементов

Г. В. Ненашев^{1, 2}, Н. Н. Губанова^{2, 3}, О. А. Шилова^{1, 2}, В. А. Мошников¹

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

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

³ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Разработка электроактивных нанокompозитных материалов для энергонакопительных устройств и гальванических элементов с внешней подачей «топлива» является актуальной задачей на сегодняшний день. Это подтверждается современными разработками альтернативного транспорта в странах Азиатско-Тихоокеанского региона [1].

Как известно, главной проблемой топливных элементов (ТЭ) является высокая себестоимость мембраны типа Нафион и катализатора – платины [2, 3]. Поэтому целесообразно разработать альтернативный материал электрода ТЭ с пониженным содержанием платины в виде наночастиц, равномерно распределенных по поверхности носителя или заменить (возможно частично) платину на другие благородные металлы. Таким образом, целью текущей работы явилось выявление влияния условий синтеза на размер и структуру наночастиц на основе серебра, платины и палладия, а также установление их каталитической активности.

Моно- и биметаллические наночастицы на основе серебра, платины и палладия получали методом восстановления из водных или спиртовых растворов солей, с последующим осаждением на носитель – суперпроводящую сажу. В качестве методов исследования использовали рентгенофазовый анализ, циклическую вольтамперометрию, микроскопию и др.

Синтезированные наночастицы на основе серебра, платины и палладия имеют размеры от 5 до 30 нм. Установлено, что биметаллические наночастицы имеют более высокие показатели каталитической активности по сравнению с наночастицами, состоящими только из одного металла.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-03-00938 А.

1. Hyung-Woo Lee, Ki-Chan Kim *et al.*, Review of maglev train technologies. IEEE Transactions on Magnetics, 2006, vol. 42, issue: 7, pp. 1917–1925.
2. Carrette L., Friedrich K.A., Stimming U. Fuel cells, 2001, vol. 1, no. 1, pp. 5–39.
3. Shilova O.A., Shilov V.V., Koshel N.D., Kozlova E.V. Fizika i himiya stekla. J. Glass Phys. and Chemistry, 2004, vol. 30, no. 1, pp. 98–100.

Мемристорные свойства структуры $\text{SiO}_2/(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{11,2}(\text{LiNbO}_3)_{88,8}$

*А. Е. Никонов, А. В. Ситников, И. В. Бабкина,
Ю. Е. Калинин, М. Н. Копытин*

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Структуры, обладающие эффектами резистивного переключения, весьма привлекательны для создания нового поколения энергонезависимой памяти большой плотности с малым энергопотреблением при записи/считывании информации. При компоновке больших массивов ячеек памяти в конфигурации crossbar большое значение имеет эффект взаимного влияния на проводимость отдельных мемристорных элементов. Для исключения данного эффекта последовательно с функциональными элементами вводят диодные ключи, препятствующие возникновению обратного тока. Нами разработана структура, совмещающая в одном функциональном узле мемристорные и диодные свойства.

Методом ионно-лучевого распыления с использованием теневых масок получена структура, представленная на рис. 1.

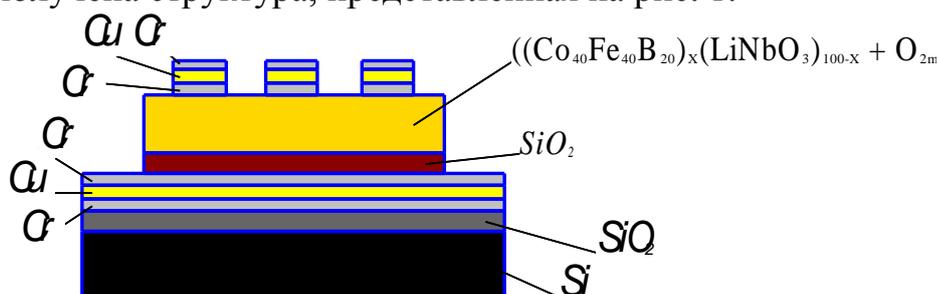
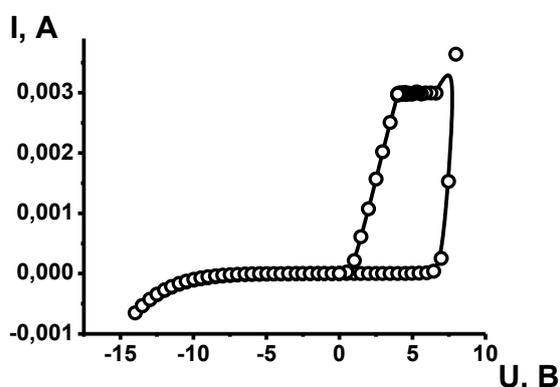


Рис. 1. Структура Cr-Cu-Cr / $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{11,2}(\text{LiNbO}_3)_{88,8}$ / SiO_2 / Cr-Cu-Cr

Толщина слоев SiO_2 , $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{11,2}(\text{LiNbO}_3)_{88,8}$ и Cr-Cu-Cr порядка 15, 1500 и 1000 нм, соответственно.



Измерение ВАХ рис. 2 показало наличие гистерезиса на зависимости в области положительных смещений напряжения, приложенных к верхнему электроду. При отрицательных напряжениях значения тока через структуру незначительно.

Рис. 2. ВАХ-структуры Cr-Cu-Cr / $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{11,2}(\text{LiNbO}_3)_{88,8}$ / SiO_2 / Cr-Cu-Cr

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03022 мк.

Контроль параметров запрещенных зон высоких порядков в фотонных кристаллах из анодного оксида алюминия

А. А. Ноян¹, С. Е. Кушнир^{2, 3}, К. С. Напольский^{2, 3}

¹ *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

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

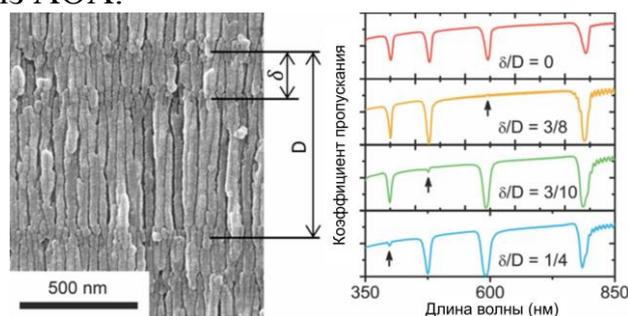
³ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия*

Одномерные (1D) фотонные кристаллы из анодного оксида алюминия (АОА) получают электрохимическим окислением алюминия при периодически изменяющемся напряжении или плотности тока. Фотонные кристаллы из АОА перспективны для создания узкополосных оптических фильтров, оптических меток и декоративных покрытий.

В настоящей работе предложен и получен новый тип 1D фотонных кристаллов из АОА с несколькими отражающими плоскостями в элементарной ячейке. Анодирование алюминия проводили в 1,0 М H₂SO₄ при температуре 0–2 °С. Отражающие плоскости были сформированы при плотности тока 0.38 мА/см² и отличались от основной части плёнки, полученной при $j = 2.15$ мА/см², пористостью и эффективным показателем преломления. Показано, что, изменяя положение отражающих плоскостей в элементарной ячейке, можно управлять интенсивностями фотонных запрещенных зон высоких порядков или добиваться их полного исчезновения.

Предложена теоретическая модель, позволяющая предсказать интенсивность фотонных запрещенных зон в зависимости от структуры фотонного кристалла. На примере ФК с двумя отражающими плоскостями в каждом периоде показано, что экспериментальные значения коэффициентов пропускания для запрещенных зон хорошо согласуются с моделью. Такое согласование подтверждает возможность использования предложенной модели для выбора режима анодирования фотонных кристаллов с требуемыми оптическими свойствами.

Приемы управления интенсивностями фотонных запрещенных зон высоких порядков и использования условий деструктивной интерференции для их подавления расширяют существующие методы получения одномерных фотонных кристаллов из АОА.



Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-03-01237.

Рост и структура кристаллов триметилсилильного производного тетрафенилбутадиена

*А. А. Островская^{1,2}, В. А. Постников¹, Н. И. Сорокина¹, А. А. Кулишов¹,
М. С. Лясникова¹, В. В. Гребенев¹, О. В. Борщев³, М. С. Скоротецкий³*

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

² МИРЭА – Российский технологический университет (МИТХТ), Москва, Россия

³ Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва, Россия

В докладе впервые представлены исследования роста из растворов и структуры кристаллов нового органического люминофора 2TMS-TPB-триметилсилильного производного тетрафенилбутадиена (рис. а). Данное вещество характеризуется высоким квантовым выходом люминесценции в кристаллическом состоянии и является перспективным органическим сцинтиллятором.

В процессе роста из растворов кристаллы 2TMS-TPB формируются в виде игл (рис. б). Кристаллическая структура игольчатых образцов исследована методом монокристаллической рентгеновской дифракции на дифрактометре Xcalibur S (Oxford Diffraction) при 90 и 293 К. При низкой температуре кристаллы 2TMS-TPB существуют в триклинной модификации P-1, а при комнатной – в моноклинной C2/c. С помощью метода ДСК на термоаналитическом комплексе STA Netzsch 449 F1 для исследуемого соединения установлена температура плавления $T_m = 211.8\text{ °C}$ и выявлен полиморфный переход при $T_{tr} = 173\text{ °C}$.

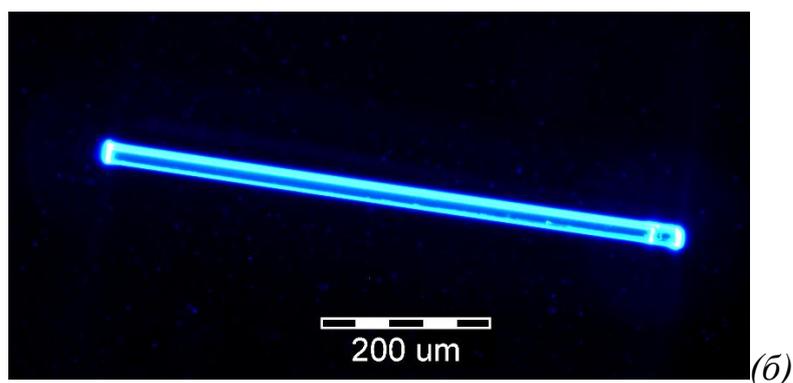
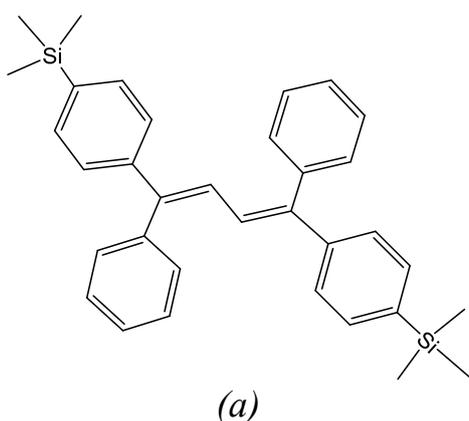


Рис. Структурная химическая формула (а) и кристалл 2TMS-TPB под УФ освещением (б)

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Электронное строение и оптическое поглощение фуллеренов как сильно коррелированных систем на примере изомера № 181 (C_2) фуллерена C_{96}

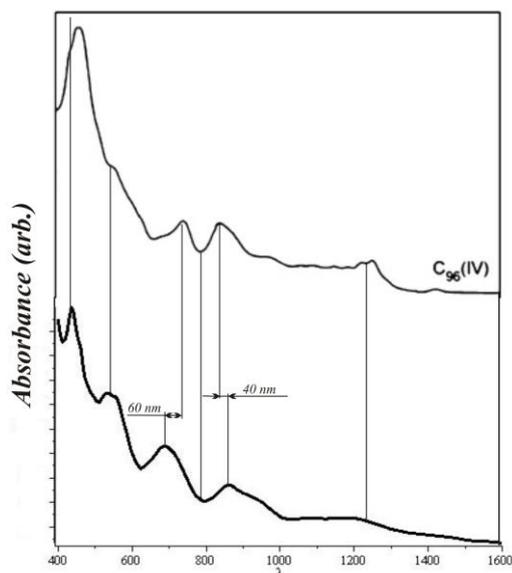
С. К. Паймеров, А. И. Мурзашев, М. Ю. Кокурин

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Опираясь на результаты [1], согласно которым в углеродных системах с sp^2 -гибридизацией внутриузельное кулоновское взаимодействие (ВУКВ) ~ 10 эВ, в рамках модели Хаббарда вычислен энергетический спектр π -электронной подсистемы изомера № 181 фуллерена C_{96} симметрии C_2 . Полученный энергетический спектр представляет собой совокупность двух «хаббардовских» подзон. Верхняя соответствует состояниям с двукратным занятием электронами узла, нижняя – однократным. Расстояния между соответствующими состояниями двух подзон равно U . Верхняя хаббардовская подзона пуста, нижняя – полностью заполнена. Расчеты без учета кулоновского взаимодействия (в рамках такого подхода традиционно изучаются электронные и оптические свойства фуллеренов) дают одну зону, которая идентична одной из подзон, и заполнена наполовину. В первом случае каждое состояние содержит один электрон с произвольной ориентацией спина,

во втором – содержит два электрона с противоположными спинами.

Таким образом, учет ВУКВ, ~ 10 эВ, кулоновского взаимодействия приводит к коренной перестройке оптических переходов в фуллеренах. Оптические переходы с учетом кулоновского взаимодействия идут между состояниями разных подзон. Спектр оптического поглощения (СОП), полученный с учетом сказанного и правил отбора для группы симметрии C_2 , представлен на рисунке. Верхняя кривая эксперимент [2], нижняя – наш результат. Видно, что теоретическая и экспериментальные кривые на хорошем качественном уровне совпадают. Такой



СОП изомера №181 фуллерена C_{96}

результат говорит о том, что корректное изучение электронных и оптических свойств фуллеренов возможно лишь с учетом ВУКВ.

1. T.O. Wehling, E. Şaşıoğlu *et al.* Phys. Rev. Lett. 106, 236805 (2011).
2. H. Yang, H. Jin *et al.* Chem. Eur. J. 106, 2792 (2012).

Коллойдосомы для инкапсулирования энергоемких материалов

К. В. Паламарчук¹, Т. В. Букреева^{1, 2}, Д. Г. Щукин³

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

² *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

³ *Стефенсоновский институт возобновляемой энергии Ливерпульского университета, Ливерпуль, Англия*

В настоящее время активно ведутся разработки в области инкапсулирования энергоёмких материалов – источников альтернативной «зеленой» энергии. В качестве теплоаккумулирующих веществ особое внимание уделяется веществам с фазовым переходом. Заключение таких веществ в капсулы помимо стабилизации системы и защиты содержимого капсул от внешней среды приводит к модификации поверхности инкапсулированной фазы, что влияет на свойства инкапсулированного материала.

Перспективным объектом для целого ряда применений, включая биомедицину, пищевые технологии, сельское хозяйство, являются эмульсии, стабилизированные коллоидными частицами (эмульсии Пикеринга) и капсулы на их основе – коллойдосомы. В нашей работе проведено формирование коллойдосом с эйкозаном на основе двух типов наночастиц: диоксида кремния Ludox SM-30 и детонационных наноалмазов [1]. Для достижения промежуточной смачиваемости поверхности наночастиц масляной и водной фазами, что является условием самоорганизации наночастиц на границе раздела фаз, в систему добавляли поверхностно-активные вещества: цетилтриметиламмоний бромид и Спан 80. Были выбраны оптимальные концентрации ПАВ и соотношения «вода : масло». Проведено исследование полученных систем методами конфокальной микроскопии, сканирующей электронной микроскопии, термогравиметрического анализа, дифференциальной сканирующей калориметрии. В результате работы созданы энергоемкие капсулы нового типа со средним диаметром 3-5 мкм, устойчивые в течение десятков циклов поглощения/высвобождения тепла.

Исследование выполнено с использованием оборудования РЦ «Органических и гибридных материалов» НИЦ «Курчатовский институт» при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-53-10013 КО_а.

1. A.T. Dideikin, A.E. Aleksenskii *et al.* Carbon. 122, 737 (2017).

Люминесценция углеродных наночастиц, осажденных на кремниевую поверхность

В. Б. Пикулев, А. А. Корожнева, С. В. Логинова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Люминесценция углеродных наночастиц (C-dots) представляет собой уникальное явление, изучению и объяснению которого посвящено большое количество современных исследований в физике наноматериалов. Представляет интерес квантоворазмерная интерпретация люминесценции, учитывающая роль различных дефектов на поверхности C-dots. Интерес к практическому применению исследуемого вещества в первую очередь связан с его высокой биосовместимостью и возможностью получать C-dots с контролируемыми оптическими характеристиками [1].

В работе реализован способ получения люминесцирующих C-dots электролизом этилового спирта с добавлением NaOH [2]. Были использованы платиновые электроды; разность потенциалов – 35 В. Отфильтрованная дисперсия содержала наночастицы с размерами до 6 нм. Химическая чистота дисперсии контролировалась с помощью ИК Фурье-спектрометра ФТ-801.

Для исследования фотолюминесцентных (ФЛ) и оптических свойств C-dots использовались спектральные комплексы на основе спектрографа SL100M с ПЗС-детектором FLI ML-1107 и на основе монохроматора МДР-23 с ФЭУ-106, спектрофотометр СФ-56, эпи-флуоресцентный микроскоп МИКМЕД-2.16. В качестве источников возбуждения ФЛ использовались He-Cd лазер (325 нм), ртутная и ксеноновая лампы.

Спектр ФЛ наночастиц в растворе сходен со спектром ФЛ C-dots, высаженных на поверхность кремниевой пластины и представляет собой широкий пик с максимумом при 460 нм в первом случае, и 520 нм – во втором. Спектр поглощения раствора C-dots имеет плавный подъём с 580 нм, выходя на максимум к 300 нм. Кинетики ФЛ высаженных на кремний наночастиц не показывают деградации люминесценции. C-dots были высажены на пористый кремний (por-Si), обладающий собственной ФЛ с максимумом при 680 нм. В результате введения C-dots максимум спектра ФЛ сдвинулся к 620 нм. Второй пик, характерный для C-dots, не проявился. Полученные результаты свидетельствуют о существовании энергообмена между C-dots и кремниевыми наноструктурами и дают новую информацию для выяснения природы ФЛ C-dots.

1. G.Hong, S. Diao, A. Antaris, H. Dai, Chem. Rev., 115, 19 (2015).
2. J. Deng, Q. Lu, N. Mi *et al.*, Chemistry, 20, 17 (2014).

Диэлектрические свойства и полярное состояние монокристаллов $\text{PbCo}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$

А. Д. Полушина, Е. Д. Обозова, Н. С. Петрова, С. Г. Лушников

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

Кристаллы $\text{PbCo}_{1/3}\text{Ta}_{2/3}\text{O}_3$ (РСТ) относятся к семейству перовскитов $\text{AB}'\text{B}''\text{O}_3$ со сложным замещением четырехвалентного катиона в В-позиции ионами разной валентности. В это семейство входят материалы с уникальными физическими свойствами: сегнетоэлектрики, сегнетоэлектрики – релаксоры и мультиферроики [1]. Согласно первым исследованиям [2] в РСТ обнаружены широкие, до 120 К максимумы диэлектрической проницаемости в окрестности температуры 133 К. При этом данные о зависимости температурного смещения максимумов от частоты электрического поля не приведены, а исследование поляризационного отклика на внешнее электрическое поле оказалось невозможными из-за малой ширины петель гистерезиса. Это мотивировало нас провести температурные исследования диэлектрического отклика и поляризации в РСТ.

В работе представлены результаты исследований температурных зависимостей диэлектрической проницаемости в диапазоне частот от 12 Гц до 100 кГц и АС- и ДС-проводимости интервале температур 77–700 К. Полярное состояние кристалла исследовалось методом термостимулированной деполяризации (ТСД).

Исследование тока ТСД показывает, что в области температуры 230 К имеется максимум тока деполяризации, связанный с остаточной поляризацией, существующей при температуре ниже 250 К. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости демонстрирует два широких максимума: со слабой частотой зависимостью в области 175 К и со значительной дисперсией при температурах выше 350 К. Данные исследования АС- и ДС- проводимости показали, что энергия активации носителей заряда составляет 0.45 eV, такая же как в родственном кристалле $\text{PbCo}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (РСН). Согласно предложенной модели в РСТ, также как в РСН, существует структура из полярных областей, которая разрушается с увеличением температуры.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18 -502-51050).

1. Smolensky G.A.: Ferroelectrics and Related Materials. NY: Academic Press, 1981.
2. Bokov V.A., Mylnikova I.E.: Phys of Solid State. 1960, 11: 2728–2732.

Исследование оптических и электрических явлений в монокристаллах $\text{PbNi}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$

*А. Д. Полушина, В. Г. Залесский, Е. Д. Обозова, Т. А. Смирнова,
М. А. Брюшинин, С. Г. Лушников*

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

Кристаллы $\text{PbNi}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PNN) принадлежат семейству сложных перовскитов $\text{AB}'\text{B}''\text{O}_3$, к которому относится известный сегнетоэлектрик-релаксор $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$. PMN является потенциальным релаксором-мультиферроиком, имеющим магнитоактивный катион Ni в В-позиции. PNN характеризуется релаксороподобными широкими и частотозависимыми максимумами диэлектрической проницаемости в окрестности температуры 153 К [1, 2]. В отличие от остальных реальных и потенциальных релаксоров-мультиферроиков PNN оптически прозрачен в видимом диапазоне длин волн. Кроме того, ион Ni переменной валентности предполагает фоторефрактивные свойства.

В работе представлены результаты исследования температурных зависимостей диэлектрической проницаемости и проводимости на постоянном (DC) и переменном токе (AC) в интервале температур 77–400 К. Показана температурная зависимость спонтанного двулучепреломления в интервале 100–350 К, при этом наибольшее изменение этой величины наблюдается в области температур 210–240 К. При комнатной температуре обнаружен нестационарный голографический фототок (нестационарная фотоэдс) величиной 4–80 фА, возбуждаемый излучением одночастотного твердотельного лазера с выходной мощностью 170 мВт и длиной волны 660 нм. В интерферометре Тваймана – Грина формировалась колеблющаяся интерференционная картина, которой затем освещался образец с двумя электродами. Появление переменного тока обусловлено периодическими смещениями распределений фотопроводимости и объемного заряда относительно друг друга. Получены зависимости амплитуды сигнала от интенсивности света, пространственной частоты и частоты колебаний картины.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18 -502-51050).

1. Smolensky G.A.: Ferroelectrics and Related Materials. NY: Academic Press, 1981.
2. Bokov V.A., Mylnikova I.E.: Phys of Solid State. 1960, 11: 2728–2732.

Выявление особенностей поведения пористого материала инфракрасных радиационных интерметаллидных горелок при горении пропан-воздушной смеси

А. А. Пономарева¹, В. А. Матвеев², Е. П. Дац¹, К. А. Цой³

¹ *Институт прикладной математики ДВО РАН, Владивосток, Россия*

² *НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия*

³ *Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*

Интерметаллические Ni–Al пористые материалы, полученные самораспространяющимся высокотемпературным синтезом (СВС), представляют практический интерес из-за возможности их применения в различных областях энергетики. Эти материалы могут быть использованы в качестве каталитических матриц, подложек для твердооксидных элементов, а также в качестве основного материала для изготовления инфракрасных радиационных горелок различной мощности. Преимуществами метода СВС являются высокая производительность и энергосберегающий эффект, а также возможность синтезировать крупнопористые материалы с уникальной структурой пор [1]. Для запуска горелки в корпус подаётся топливо-воздушная смесь с заданным коэффициентом избытка воздуха, пламя поджигается либо с внешней поверхности, либо во внутренней части инфракрасного излучателя, после чего в течение 30-60 секунд пламя стабилизируется во внутреннем объеме излучателя [2].

Физико-химические процессы и изменение свойств пористого материала инфракрасных радиационных интерметаллидных горелок при длительном горении топливо-воздушных смесей еще слабо изучены. При этом экспериментально были зафиксированы случаи изменения цвета материала горелок, а также их растрескивание. Математическое моделирование свойств пористой горелки показали, что горелка с более низкой теплопроводностью имеет более высокую эффективность. При низкой теплопроводности пористой матрицы фронт пламени расположен вблизи входа в горелку. Вычисления также показали, что максимальная эффективность горелки достигается при некотором оптимальном размере пор [3]. Это накладывает вполне определенные требования к свойствам пористой матрицы. Экспериментально изучена структурная деградация материала, выявлен незначительный выход Ni с поверхности горелки, обусловленный реакциями с компонентами продуктов горения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2019-1878).

1. R. Fursenko, A. Maznoy *et al.* K. Int. J. Heat & Mass Transfer., 98 (2016).

2. Патент: RU 2640305. С. С. Минаев, А. Н. Гушин и др.

3. E.P. Dats *et al.* J. Phys.: Conf. Ser. 1115 (2018) 042023.

Внутреннее трение в композитах на основе полимерной матрицы Т-107

И. И. Попов, М. А. Каширин, О. В. Овдак, А. М. Кудрин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Исследованы температурные зависимости внутреннего трения (Q^{-1}) композиционного материала на основе угле- и стекловолокон с процентным соотношением компонентов 25/75, 50/50 и 75/25 в матрице полимерного связующего марки Т-107. В качестве наполнителя использовались однонаправленная лента с углеродным волокном Formosa TC-35 (12К) ($\sigma_B = 4000$ МПа, $E = 240$ ГПа) и стеклоткань Т-10-14. Были получены методом Hot-melt с помощью технологического комплекса пропитки COS.T.A. [1]. Измерения внутреннего трения осуществлялось с помощью изгибного маятника по методике, описанной в [2].

Результаты измерений зависимостей $Q^{-1}(T)$ показали, что при комнатной температуре величина Q^{-1} практически не отличается и составляет $\sim 1 \cdot 10^{-3} - 5 \cdot 10^{-3}$. Повышение температуры до $\sim 410 - 450$ К сопровождается незначительным ростом, который сменяется экспоненциальным ростом Q^{-1} . При приближении к температуре стеклования ($T = 458$ К) величина Q^{-1} еще больше возрастает.

Экспоненциальный рост Q^{-1} вблизи температуры стеклования связан с полимерной матрицей, а не с материалом наполнителя. Перестройка зависимости в координатах $\ln Q^{-1} \sim (1/T)$ даёт два линейных участка в области высокотемпературного фона [3].

Были определены значения энергии активации миграции точечных дефектов $E_m = 0,70 \pm 0,05$ эВ и энергии образования вакансиоподобных дефектов матрицы и $E_v = 0,66 \pm 0,05$ эВ, что в пределах погрешности совпадает со значением энергии миграции.

1. О. В. Овдак, Ю. Е. Калинин, А. М. Кудрин, О. А. Караева, Д. Я. Дегтярев. Влияние состава армирующего наполнителя на механические свойства стеклоуглепластика в матрице Т-107 // Материаловедение, 2017, № 7, с. 32–37.
2. S.A. Gridnev and I.I. Popov. Effect of the electronic subsystem on elastic and anelastic properties of ceramic $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$ // Ferroelectrics, vol. 543 (1), 2019, p. 130–136.
3. А. Новик, Б. Берри. Релаксационные явления в твердых телах. М.: Атомиздат, 1975. 472 с.

Фотолюминесценция дефектов в метаморфных гетероструктурах с квантовой ямой InAlAs/InGaAs/InAlAs при подзонном фотовозбуждении

С. С. Пушкарёв, Г. Б. Галиев, Е. А. Климов, В. Б. Копылов

Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники им. В. Г. Мокерова РАН, Москва, Россия

Для выявления фотолюминесценции (ФЛ) дефектов были исследованы сильно дефектные эпитаксиальные гетероструктуры с квантовой ямой $\text{In}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}/\text{In}_{0,7}\text{Ga}_{0,3}\text{As}/\text{In}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$ и метаморфным буфером $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.05 \rightarrow 0.65$) на подложках GaAs (100). Как ранее было установлено с помощью ПЭМ [1–3], образцы содержат протяжённые дефекты различного типа и разной плотности: прорастающие дислокации («слабодефектный» образец А), дефекты упаковки («среднедефектный» образец В), двойники («сильнодефектный» образец С). В спектрах ФЛ образцов наблюдается излучение квантовой ямы (КЯ) в области 0,6–0,8 эВ и ряд пиков в области 0,9–1,2 эВ, которые, предположительно, соответствуют переходам электронов с энергетических уровней дефектов внутри запрещённой зоны в валентную зону.

С увеличением длины волны межзонного фотовозбуждения (409 → 450 → 532 нм) наблюдается увеличение интенсивности «дефектной» ФЛ относительно ФЛ КЯ, поскольку излучение с большей длиной волны глубже проникает в гетероструктуру. Использование подзонного фотовозбуждения с длиной волны 1064 нм приводит к увеличению «дефектной» ФЛ на порядок в образцах с высокой концентрацией двойников. В таблице количественно охарактеризованы наблюдаемые закономерности ФЛ.

Обнаружено, что зависимость интенсивности «дефектной» ФЛ от плотности мощности накачки является сублинейной ($I_{\text{ФЛ}} = \eta \cdot I_{\text{pump}}^\alpha$, $\alpha = 0,9-1,0$), а для ФЛ КЯ $\alpha = 1,2-1,4$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 18-32-00157 мол_а.

Таблица. Интегральные интенсивности ФЛ КЯ $I_{\text{КЯ}}$ и «дефектной» ФЛ $I_{\text{деф.}}$ и их соотношение при накачке зеленым лазером ($\lambda = 532$ нм, мощность 320 мВт) и инфракрасным лазером ($\lambda = 1064$ нм, мощность 640 мВт)

Обр.	Зелёный лазер			Инфракрасный лазер		
	$I_{\text{КЯ}}$, усл. ед.	$I_{\text{деф.}}$, усл. ед.	$I_{\text{деф.}}/I_{\text{КЯ}}$	$I_{\text{КЯ}}$, усл. ед.	$I_{\text{деф.}}$, усл. ед.	$I_{\text{деф.}}/I_{\text{QW}}$
А	1206	466	0,39	788	1033	1,31
В	595	1765	2,97	350	605	1,73
С	9	74	8,5	24	910	39

1. Г. Б. Галиев, С. С. Пушкарёв и др. ФТП 47(4), 510 (2013).
2. G.B. Galiev, I.S. Vasil'evskii *et al.* Journal of Crystal Growth 366, 55 (2013).
3. Г. Б. Галиев, С. С. Пушкарёв и др. Кристаллография 59(3), 471 (2014).

Процессы формирования и оптические свойства эпитаксиальных наночастиц GaAs на Si

Г. А. Сапунов, А. Д. Большаков, В. В. Федоров

*Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет им. Ж. И. Алферова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Монолитное объединение полупроводниковых прямозонных структур с Si представляет большой научный и экономический интерес из-за перспективы объединения фотонных приборов с элементами Si электроники и удешевления производства существующих приборов [1]. В отличие от планарных гетероструктур, эпитаксиальные наноструктуры обладают высоким отношением поверхности к объему, обеспечивая эффективную релаксацию упругих напряжений и низкую концентрацию структурных дефектов даже в системах с сильным рассогласованием кристаллических решеток [2].

Цель данной работы – изучение формирования и оптических свойств наночастиц GaAs, синтезированных на Si(111) методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Показано, что GaAs формируется в виде ограниченных наночастиц, окруженных сплошным слоем из островков GaAs. В работе исследовано изменение морфологии наночастиц в процессе роста. Наблюдаемое изменение косвенно подтверждает предположение, что наночастицы образуются по механизму пар-жидкость-кристалл, и скорость их роста значительно уменьшается после расхода Ga капли, поскольку поступающий материал начинает преимущественно встраиваться в сплошной слой.

Оптические свойства изучены методами спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) и фотолюминесценции (ФЛ) индивидуальных наночастиц. На спектрах КР отдельных эпитаксиальных наночастиц GaAs присутствует поперечная мода, характерная для GaAs в вюрцитной фазе. Сигнал ФЛ от наночастиц при комнатной температуре почти на два порядка выше сигнала от непрерывного слоя, что указывает на более высокое кристаллическое качество.

1. Y.B. Bolkhovityanov, O.P. Pchelyakov. *Physics-Uspekhi* 51 (5) 437–456 (2008).
2. Yu.B. Samsonenko, G.E. Cirlin, A.I. Khrebtov, A.D. Bouravleuv, N.K. Polyakov, V.P. Ulin, V.G. Dubrovskii, P. Werner. *Semiconductors* 45 (4) 431–435 (2011).

Гальваномагнитные свойства пленок системы «висмут – сурьма» в условиях деформации растяжения

С. В. Сенкевич¹, В. М. Грабов², В. А. Комаров², А. В. Суслов², Е. В. Демидов²

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

² *Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия*

Полуметаллы на основе висмута и сплавов «висмут – сурьма» обладают высокой чувствительностью электрических и гальваномагнитных свойств под действием деформации [1, 2]. При исследовании гальваномагнитных свойств пленок, выращенных на подложках с различным температурным расширением (КТР) нами было показано, что при температуре, отличающейся от температуры формирования пленки в условиях плоскостного растяжения в рамках двухзонного приближения происходит повышение дна зоны проводимости и понижение потолка валентной зоны по энергетической шкале относительно уровня химпотенциала, в то время как деформация плоскостного сжатия приводит к движению энергетических экстремумов в обратном направлении [2].

Поскольку каждой величине деформации пленки при данной температуре соответствует определенный материал подложки, на электрические и гальваномагнитные свойства пленок существенное влияние оказывает различие их структуры. Это создает определенные трудности при их сравнении и анализе.

В данной работе представлены результаты исследования удельного сопротивления, магнетосопротивления и коэффициента Холла пленок системы висмут-сурьма (с содержанием сурьмы до 15 ат. %) на одинаковой подложке из боросиликатного стекла в условиях контролируемой изменяемой деформации непосредственно в процессе исследования. Разработанный метод создания деформации основан на купольном изгибе подложки, в результате чего пленка оказывается в состоянии растяжения, которое в первом приближении можно считать плоскостным. Представлены расчеты параметров носителей заряда и положения экстремумов относительно уровня химпотенциала.

Результаты исследования качественно находятся в согласии с данными, полученными при исследовании пленок на подложках с различными КТР, однако на полученных зависимостях обнаружены особенности, которые могут быть связаны с электронными топологическими переходами в энергетической структуре свободных носителей заряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 18-32-00430).

1. T. Hirahara, N. Fukui, T. Shirasawa *et al.* Phys. Rev. Lett., 109, 227401 (2012).
2. A.V. Suslov, V.M. Grabov, V.A. Komarov *et al.* Semiconductors 53(5) (2019).

Синтез и исследование свойств пленок $Y_3Fe_5O_{12}$, полученных на подложках $LiNbO_3$

А. И. Серокурова^{1,2}, В. А. Кецоко¹, М. Н. Смирнова¹, С. А. Шарко²

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

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

В последнее десятилетие большое внимание уделяется разработке материалов и пленочных структур для новой области спиновой электроники - магноники [1]. Эксперименты по возбуждению СВ в магнитных пленках ранее были ограничены только структурами на основе ферромагнитных металлов [3]. Между тем, использование пленок YIG для этих задач более перспективно и обусловлено малым значением параметра затухания Гильберта α (для монокристаллов YIG $\alpha \approx 5 \times 10^{-5}$), низким значением коэрцитивного магнитного поля и высокой величиной намагниченности насыщения [2]. Поэтому разработка технологии изготовления высококачественных пленок $Y_3Fe_5O_{12}$ на несогласованных оптически прозрачных подложках остается важной задачей.

В работе впервые методом ионно-лучевого распыления – осаждения получены пленки YIG толщиной 0,5 мкм на подложках сегнетоэлектрического, монокристаллического $LiNbO_3$ и отработана технология, позволяющая воспроизводимо формировать качественные гетероструктуры в виде слоев YIG на неориентированных подложках. Образцы характеризуются качественным плоскопараллельным интерфейсом YIG/ $LiNbO_3$, о чем свидетельствуют данные РЭМ. При этом специфическое воздействие ионных пучков привело к появлению сильной адгезии осаждаемого слоя к подложке, чем обеспечивалась надежная упругая связь компонентов.

Получение гетероструктуры YIG/ $LiNbO_3$ осуществлялось методом ионно-лучевого распыления – осаждения с последующим отжигом. Затем, с целью удаления дефектов, образующихся в пленке при ее кристаллизации, слой YIG утончался. После этого проводилось повторное напыление и отжиг. С помощью рентгенофазового анализа обнаружено, что после повторного нанесения и отжига рефлексы смещаются ближе к своему равновесному значению. Это свидетельствует о полной релаксации упругих напряжений и формировании качественной структуры.

На основе данных, оптических, магнитных исследований и результатов исследований распространения спиновых волн в пленках $Y_3Fe_5O_{12}$ сделан вывод о возможности формирования высококачественных структур не эпитаксиальными методами для получения оптически прозрачных материалов стрейнтроники, а также разработки СВЧ-фильтров.

Работа выполнена при поддержке проекта БРФФИ Ф18Р-087 и гранта РФФИ № 18-29-11026 с использованием оборудования ЦКП ФМИ ИОНХ РАН.

1. Balinskiy M., Ojha Sh. *et al.* J. Appl. Phys. 2017. V. 122. 123904. P. B.
2. Pirro P., Bracher T. *et al.* Appl. Phys. Lett. 2014. V. 104. 012402-4.
3. Körner M., Lenz K. *et al.* J 2013 Phys. Rev. B 88 054405.

Электрические свойства многослойных наноструктур Mg/ZrO₂

А. Н. Смирнов, О. В. Стогней, В. А. Кириллова, И. А. Непочатая

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Многослойные наноструктуры (Mg/ZrO₂)₄₅ (45 – количество слоёв) получены методом совместного ионно-лучевого распыления металлической (Mg) и диэлектрической (ZrO₂) мишеней. Полученные структуры отличаются друг от друга толщиной слоёв магния. Многослойность структуры подтверждается данными малоугловой рентгеновской дифракции. По данным рентгеноструктурного анализа слои ZrO₂ в составе многослойной структуры (Mg/ZrO₂)₄₅ являются аморфными, слои Mg – кристаллическими.

Электрическое сопротивление структуры (Mg/ZrO₂)₄₅ уменьшается на 8 (!) порядков при увеличении номинальной толщины бислоя (Mg+ZrO₂) с 3,5 нм до 8,5 нм (рис. 1). Предполагается, что при толщинах 3,5–5,5 нм магниевые слои несплошные и состоят из изолированных наногранул. При увеличении толщины бислоя магний образует сплошные слои. Таким образом, в системе (Mg/ZrO₂)₄₅ наблюдается электрический порог перколяции при толщине бислоя 4,5-5,5 нм (рис. 1). Это согласуется с температурными зависимостями сопротивления многослойной структуры (Mg/ZrO₂)₄₅ (рис. 2). Температурные

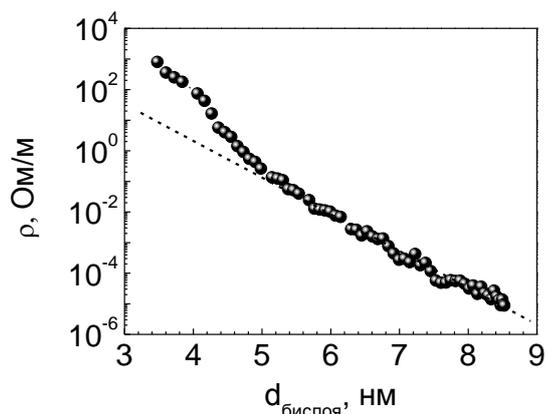


Рис. 1. Зависимость удельного сопротивления многослойной наноструктуры (Mg/ZrO₂)₄₅ от толщины бислоя (Mg+ZrO₂)

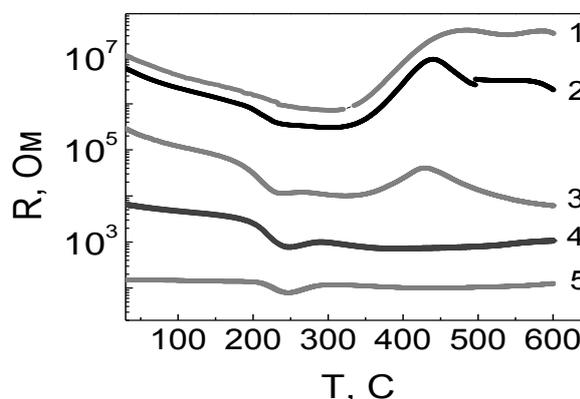


Рис. 2. Температурные зависимости сопротивления многослойных структур (Mg/ZrO₂)₄₅ с различной толщиной бислоя: 1 – 4,7 нм, 2 – 4,9 нм, 3 – 5,5 нм, 4 – 6,3 нм, 5 – 8,2 нм

зависимости образцов с несплошными слоями магния (кривые 1–3) аналогичны зависимостям, наблюдаемым в нанокompозитах «металл – диэлектрик». Для образцов, в которых слои магния являются сплошными (кривые 4–5), зависимости имеют одинаковый вид, отражая схожую морфологию структуры, с положительным ТКС при температурах выше 300 С. Минимум на зависимости R(T) при 220–240 °С обусловлен процессами рекристаллизации наноразмерных зерен магния – с увеличением среднего размера зерна температура рекристаллизации возрастает.

Компьютерное моделирование водорастворимого производного эндофуллере́на

М. В. Солонинкина, Д. В. Логинов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Актуальность исследования водорастворимых производных фуллеренов и эндометаллофуллеренов (ЭМФ) обусловлена их большим биомедицинским потенциалом, который подтверждается многочисленными работами и, в частности, [1, 2].

В данной работе приведены результаты компьютерного моделирования водорастворимого эндофуллере́на $Gd@C_{82}(OH)_{40}$. Атомная структура образца была исследована ранее, посредством рентгенографического анализа. Были сформированы кластеры, состоящие из 4–586 молекул $Gd@C_{60,70,82}$, а также кластеры с непосредственным включением молекул эндометаллофуллере́нола. Теоретически рассчитанные $H(s)$ для всех моделей достаточно хорошо описывают максимумы в области s больше 1.7 \AA^{-1} , но не описывают максимумы в меньшей области.

Кластер, состоящий из смеси 586 молекул фуллере́на с внедрением молекул эндофуллере́нола (рис. а), приводит к появлению на теоретической кривой интенсивного максимума в области 1.2 \AA^{-1} . Можно предположить, что данный максимум обусловлен высокой степенью упорядоченности модели. Поэтому, было сделано предположение, о необходимости внесения хаотичности в расположение молекул в конфигурацию. Теоретическая кривая $H(s)$ кластера, состоящего из эндофуллере́нолов в количестве 54 % от общего количества (от 238 молекул), а остальные 46 % относятся к смеси из ЭМФ и пустых фуллере́нов (рис. б) с хаотичным расположением молекул приводит к значительному уменьшению интенсивности максимума в области 1.2 \AA^{-1} , но также происходит увеличение интенсивности пика в области 4.6 \AA^{-1} . Было сделано предположение, что дальнейшее моделирование надо проводить на кластере имеющим области упорядоченного и хаотичного расположения молекул.

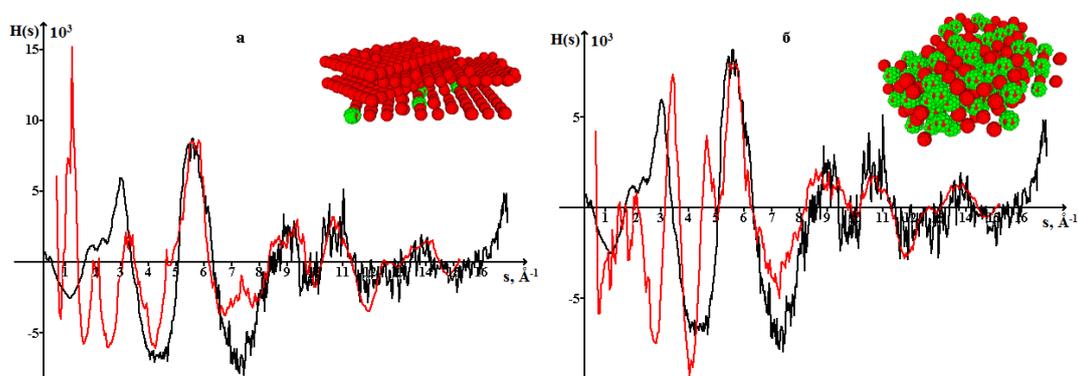


Рис. Сравнение экспериментальной (—) и теоретических (—) кривых $H(s)$ для моделей

1. Kato H., Kanazawa Y., Okumura M. *et al.* Lanthanoid Endohedral Metallofullerenols for MRI Contrast Agents // *J. Am. Chem. Soc.* 2003. V. 125. No. 14. P. 4391–4397.
2. Shilin V.A., Szhogina A.A., Suyasova M.V. *et al.* Fullerenes and Fullerenols Survival under Irradiation // *Nanosystems: Phys. Chem. Math.* 2016. V. 7. No. 1. P. 146–152.

Джозефсоновские контакты на основе единичных металлических нанонитей

С. В. Сотничук¹, О. В. Скрыбина^{2, 3}, В. С. Столяров^{1, 2, 3}, К. С. Напольский¹

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

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

³ *Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

Одной из проблем современной микроэлектроники является высокое тепловыделение в узлах полупроводниковых структур. Данной проблемы лишены сверхпроводящие логические элементы, в основе которых лежат свойства слабых связей (джозефсоновских контактов). Данная работа посвящена разработке новых методик получения миниатюрных джозефсоновских контактов на основе единичных нанонитей.

Формирование металлических нанонитей проводили темплатным электроосаждением в пористые матрицы анодного оксида алюминия (АОА), полученные по двухстадийной методике в 0,3 М $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ при 40 В. Электроосаждение металлов (Cu, Co, Au) осуществляли в потенциостатическом режиме из электролитов, содержащих ионы соответствующих металлов. Для получения сегментированных нанонитей Au/Ni использовали роботизированную электрохимическую установку. Извлечение нанонитей из матрицы АОА проводили в 1,25 М растворе NaOH с добавлением 4 г/л поливинилпирролидона (ПВП), позволяющего уменьшить эффект агрегации нитей. Токоподводящие Nb контакты к единичным нанонитям, высаженным на Si/SiO_x подложку методом центрифугирования, были изготовлены с помощью электронной литографии и магнетронного напыления.

По данным рентгенофазового анализа выбранные условия электроосаждения приводят к формированию нанонитей с ярко выраженной текстурой, что свидетельствует об их преимущественно монокристаллической структуре. Для Au нанонитей критический ток составляет 40 мкА ($L_{ce} \sim 180$ нм, $d \sim 60$ нм) при $T = 1,2$ К. В случае Co нанонитей критический ток не наблюдался даже для длины слабой связи менее 200 нм. Для контакта Nb/Au/Ni(20 нм)/Au/Nb при температуре около 2 К экспериментально наблюдается уменьшение сопротивления системы, что предположительно связано с эффектом Джозефсона.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00981.

Влияние деформации в камере Бриджмена на локальную атомную структуру аморфных сплавов на основе железа

*Р. В. Сундеев¹, А. В. Шалимова², А. А. Велигжанин³,
А. М. Глезер⁴, Т. В. Рассадина¹*

¹ МИРЭА – Российский 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

⁴ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия

Методами EXAFS спектроскопии в синхротронном изучении, просвечивающей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа проанализировано влияние температуры деформации (293 и 77 К) при кручении под высоким давлением (КВД) в камере Бриджмена на атомную структуру и тепловой эффект кристаллизации при непрерывном нагреве аморфных сплавов $Fe_{83-x}Ni_xB_{17}$ ($x = 25, 29, 33$), полученных закалкой из расплава. Обнаружено, что КВД при величине деформации $e = 4$ при 293 К приводит к снижению теплового эффекта кристаллизации при нагреве, а при 77 К – к его возрастанию.

Методом EXAFS в синхротронном излучении установлено, что КВД при 77 К приводит к изменению локальной атомной структуры вокруг атомов железа (к разрушению локального ближнего порядка, к повышению средних координационных чисел и к снижению среднего расстояния между парами атомов различного типа в первой координационной сфере). Изменения локальной атомной структуры вокруг атомов никеля не обнаружено. Методом просвечивающей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа показано, что КВД при 293 К приводит к частичной кристаллизации аморфного состояния. Величина относительной объемной доли нанокристаллов фазы $\alpha(\gamma)$ -Fe-Ni варьируется в интервале (0,17-0,25) и зависит от температуры кристаллизации каждого сплава при последующем непрерывном нагреве.

Сделано заключение, что различный характер влияния температуры КВД на тепловой эффект кристаллизации при непрерывном нагреве обусловлен разнонаправленным влиянием больших пластических деформаций при различных температурах (293 и 77 К) на степень неравновесности формирующихся структурных состояний аморфных сплавов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-32-70007) и гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (МК-43.2020.2).

Послойный рентгенофазовый анализ цементированных слоев железных сплавов

К. Д. Суринский, А. В. Покоев

*Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева,
Самара, Россия*

Одним из информативных методов исследования кристаллических объектов, является рентгеноструктурный анализ. В этой связи, представляется перспективным применение методов рентгенографии для неразрушающего исследования параметров цементированного слоя и оценки качественных показателей цементированных изделий. Информации о структуре и фазовом составе цементированного слоя с различных глубин можно получать с использованием рентгеновского излучения с различной длиной волны, съемкой с послойным удалением материала образца, или изменением угла наклона первичного пучка относительно поверхности образца.

В настоящей работе представлены результаты сравнительного исследования разрушающими и неразрушающими методами фазового состава по глубине цементированных слоев модельных сплавов на основе железа. Объектами исследования являлись цементированные образцы технически чистого железа (сталь 1088) и модельных сплавов (содержание углерода 0,08 вес. %), изготовленных для проведения экспериментов со строго контролируемыми параметрами цементации. Цементацию образцов вели в твердом карбюризаторе при температуре 930 °С; время цементации 30 и 120 мин. Первую часть образцов после цементации закаливали быстрым погружением в воду при комнатной температуре, вторую – охлаждали на воздухе. Глубина цементации составила 300 и 800 мкм соответственно.

Результаты послойного рентгенофазового анализа в излучениях $\text{CoK}\alpha$ и $\text{AgK}\alpha$ позволили изучить особенности распределения фаз по глубине. Комплексом методов установлено, что структура цементированных слоев многофазна, количественное соотношение фаз существенно зависит от глубины залегания, а распределение концентрации углерода неоднородно по фазам.

Использование $\text{AgK}\alpha$ на первом и третьем порядке отражения позволило сравнить и уточнить результатов анализа, проведенного на различных излучениях.

Таким образом, установлена принципиальная возможность реализации неразрушающей диагностики цементированных слоев железных сплавов, толщиной порядка 1000 мкм.

1. Миркин Л. И. Рентгеноструктурный контроль машиностроительных материалов: Справочник. – М.: Машиностроение, 1979. – 134 с.
2. Петухов В. Ю., Гумаров Г. Г. Исследование поверхностных слоев твердых тел методом скользящего рентгеновского пучка // Учебно-методическое пособие для студентов физического факультета. – Казань: КГУ, 2009. – 16 с.

Термоэдс тонких пленок висмута на слюде

*М. В. Суслов, В. М. Грабов, В. А. Герега, Е. В. Демидов,
В. А. Комаров, А. В. Суслов*

*Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия*

Поиску и совершенствованию термоэлектрических материалов посвящено огромное количество работ. Оптимизация массивных материалов привела к заметному улучшению термоэлектрических свойств в определенных температурных интервалах, но существенно значимого увеличения термоэлектрической эффективности не было достигнуто.

Низкоразмерное состояние вещества представляет актуальное направление поиска эффективных термоэлектрических материалов. В работах [1, 2] было теоретически показано, что квантование энергии носителей заряда в пленках и нитях из-за возрастания плотности состояний носителей заряда вблизи уровня Ферми приводит к возрастанию термоэдс и существенному увеличению их термоэлектрической эффективности.

Существенное возрастание термоэдс в тонких пленках вследствие квантового размерного эффекта должно происходить при толщинах соизмеримых с длиной волны де Бройля носителей заряда $\lambda = h/\sqrt{2E_F m^*}$. Поэтому, для экспериментального обнаружения данного эффекта лучше выбирать материалы, имеющие большую длину волны де Бройля носителей заряда и высокие значения термоэдс при низких температурах. Монокристаллы висмута обладают достаточно большими значениями термоэдс при низких температурах (при $T = 77$ К $\alpha_{11} = -40$ мкВ/К) и большим значением λ , которое в направлении оси C_3 составляет 67 нм для электронов и 11 нм для дырок при температуре 77 К.

В работе измерены значения термоэдс монокристаллических и блочных пленок висмута в диапазоне толщин от 1 мкм до 10 нм, полученных методом термического испарения в вакууме. Исследование проведено в интервале температур 77–300 К. В качестве подложек использовалась слюда (мусковит). Обнаружена существенная зависимость значения термоэдс от толщины пленок. Произведена интерпретация полученных результатов в рамках классического и квантового размерных эффектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00242).

1. L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B. 47, 12727 (1993).
2. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, X. Sun *et al.* Phys. Solid State. 41, 679 (1999).

Диэлектрические свойства Yb_2TiO_5

К. Ю. Терентьев, А. А. Дубровский, К. А. Шайхутдинов

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

Титанаты редкоземельных металлов (РЗМ) являются интересными материалами, с точки зрения изменения магнитных, электрических и оптических свойств при изменении параметров синтеза, стехиометрии и внешних условий [1].

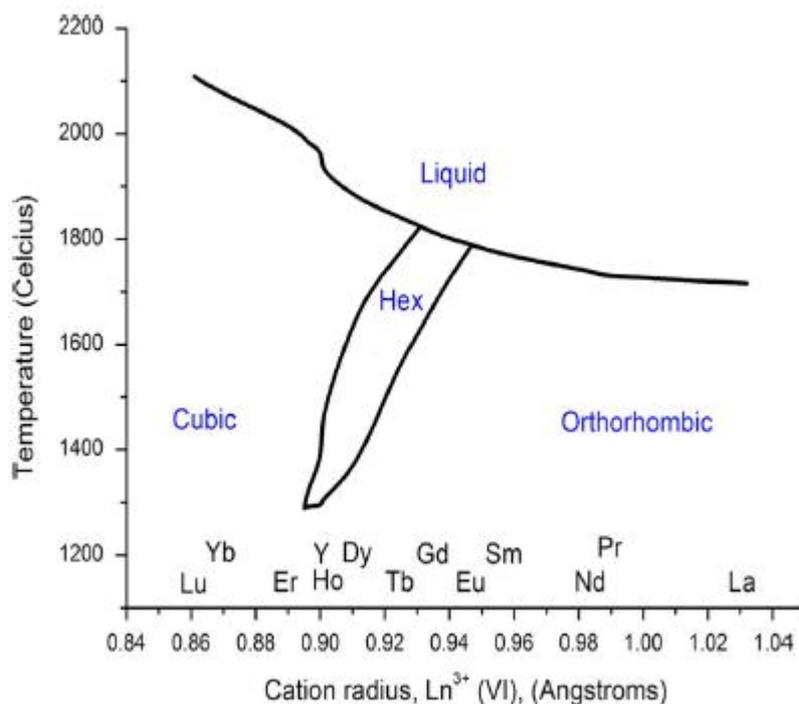


Рис. 1. Взаимосвязь структуры титанатов РЗМ, величины ионного радиуса и температуры плавления [2]

При уменьшении ионного радиуса РЗМ происходит переход из орторомбической фазы в кубическую. Таким образом, кубическая фаза характерна для титанатов с 4 РЗМ с наименьшими ионными радиусами: Er-Lu. Эти материалы изучаются преимущественно с прикладной целью утилизации трансурановых производных, поскольку кубическая фаза со структурой дефектного флюорита обладает чрезвычайной радиационной, коррозионной и термической устойчивостью [3].

Мы изучаем физические свойства данных материалов, а именно электрические свойства. В рамках данной работы были синтезированы монокристаллы Yb_2TiO_5 , в чистом виде являющиеся диэлектриками.

Монокристаллы были получены методом зонной плавки (установка Crystal Systems Corporation, model; FZ-T-4000-N-VI-VPM-PC). Образцы в виде дисков выпиливались из полученных монокристаллов цилиндрической формы. Далее образцы помещались в измерительную ячейку Quantum design PPMS.

Были проведены измерения электрической емкости при изменении температуры, магнитного поля и частоты. Было показано, что магнитное поле и частота подавляют диэлектрические параметры материала. В частности, увеличение частоты от 1 до 100 кГц приводит к уменьшению емкости в 50 раз.

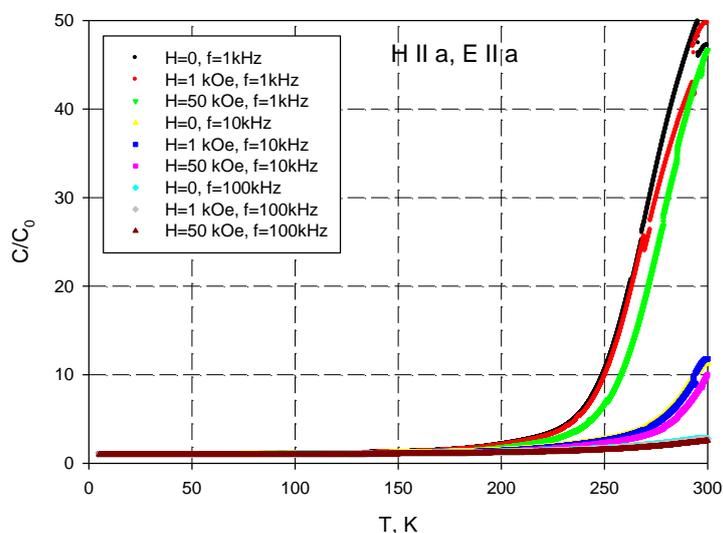


Рис. 2. График относительного изменения электрической емкости при росте температуры во внешнем магнитном поле и при различных частотах

1. Y.F. Shepelev, M.A. Petrova, Inorg. Mater. 44(12) (2008) 1354–1361.
2. Robert D. Aughterson, Gregory R. Lumpkin, Massey de los Reyes, Neeraj Sharma, Christopher D. Ling, Baptiste Gault, Katherine L. Smith, Maxim Avdeev, Julie M. Cairney, Journal of Solid State Chemistry 213 (2014) 182–192.
3. V. Risovany, E. Varlashova, D. Suslov, J. Nucl. Mater., 281 (1) (2000), pp. 84–89.

Получение и исследование новых кристаллов в системе $K_2SO_4 - Rb_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$

*И. С. Тимаков, В. В. Гребенёв, В. А. Коморников, О. Б. Зайнуллин,
Е. В. Селезнёва, И. П. Макарова*

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

Изучение кристаллов-суперпротонов актуально как для решения фундаментальных научных проблем, так и с точки зрения практического применения. Отличительная особенность рассматриваемых соединений, представляющих семейство $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ (где $M = K, Rb, Cs, NH_4$; $AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, HAsO_4$), заключается в аномально высокой протонной проводимости, проявляющейся при относительно невысоких температурах вследствие фазового перехода. Одной из основных задач исследования кристаллов-суперпротонов является установление связи между составом, атомной структурой и их физическими свойствами. Практическая же значимость обусловлена перспективами их применения в качестве материалов для электрохимического оборудования, включая мембраны водородных топливных элементов.

С целью получения новых соединений семейства $M_mH_n(AO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ были изучены фазовые равновесия в четырехкомпонентной водно-солевой системе $K_2SO_4 - Rb_2SO_4 - H_2SO_4 - H_2O$ [1]. Были разграничены области кристаллизации, установлены значения растворимости и определены условия воспроизводимого получения крупных монокристаллов твердых растворов: $(K_xRb_{(1-x)})_2SO_4$, $(K_xRb_{(1-x)})_3H(SO_4)_2$, $(K_xRb_{(1-x)})_9H_7(SO_4)_8 \cdot yH_2O$ и $K_xRb_{(1-x)}HSO_4$.

Проведены исследования полученных монокристаллов комплексом физико-химических методов, включая импедансную спектроскопию, дифференциальную сканирующую калориметрию, микроскопию в поляризованном свете при различных температурах и рентгеноструктурный анализ.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

1. В. А. Коморников, И. С. Тимаков и др. Кристаллография 64, 979 (2019).

Магнитокалорические свойства объемно-аморфных сплавов $Gd_{60}Al_{15}(Co_{1-x}Ni_x)_{25}$

Н. С. Упорова¹, С. А. Упоров², В. А. Быков²

¹ *Институт геологии и геохимии им. акад. А. Н. Заварицкого УрО РАН,
Екатеринбург, Россия*

² *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В последние годы аморфные сплавы, разработанные во многих системах, вызвал большой интерес благодаря их превосходным свойствам, обусловленными неупорядоченной атомной конфигурацией. Среди этих сплавов, металлические стекла на основе редкоземельных элементов (РЗМ) с добавками 3d-переходных металлов (ПМ) показали значительную ценность в науке и технике из-за их уникальных свойств. Недавние исследования показали, что аморфные сплавы на основе Gd являются очень привлекательными кандидатами для магнитного охлаждения [1], так как металлические стекла, образующиеся в системах Gd-Al-ПМ, обладают гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ).

Быстро-закаленные сплавы составов $Gd_{60}Al_{15}(Co_{1-x}Ni_x)_{25}$, где $x=0.2; 0.3$ получены электродуговым плавлением из исходных металлов чистотой более 99.9 мас. % и последующим вакуумным литьем в медную изложницу. Закаленные образцы представляли собой тонкие стержни с переменным диаметром от 1 до 3 мм, длиной около 40 мм. Структура закаленных сплавов изучена дифракционным методом. Анализ процессов кристаллизации образцов проведен методом дифференциально-сканирующей калориметрии на анализаторе NETZSCH STA 409. Магнитные характеристики изучены на вибрационном магнитометре Cryogenic VSM CFS-9T-CVTI и оригинальной экспериментальной установке, основанной на методе Фарадея.

Новые объемно-аморфные сплавы $Gd_{60}Al_{15}(Co_{0.8}Ni_{0.2})_{25}$ и $Gd_{60}Al_{15}(Co_{0.7}Ni_{0.3})_{25}$ получены с максимальным диаметром 3 мм. Образцы имеют полностью аморфную структуру, характеризуются стеклованием, многостадийной кристаллизацией и почти эвтектическим плавлением, обладают ферромагнитными свойствами. Наибольшее расчетное значение относительной мощности охлаждения (RCP) при магнитном поле 5 Тл получено для сплава $Gd_{60}Al_{15}(Co_{0.8}Ni_{0.2})_{25}$ и составляет $860 \text{ Дж} \times \text{кг}^{-1}$, что является одним из максимальных значений для сплавов на основе гадолиния на сегодняшний день. Полученный результат делает данное стекло перспективным материалом для использования в магнитных холодильных установках.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-03-00626 и частично поддержана темой государственного задания ИГГ УрО РАН № 0316-2019-0004.

1. Mayer C., Gorsse S. *et al.* Journal of Applied of Physics. 053920, 110 (2011).

Процессы формирования эпитаксиальных массивов самокаталитических нитевидных нанокристаллов GaP на Si (111)

С. В. Федина, Г. А. Сапунов, В. В. Федоров

*Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет им. Ж. И. Алферова РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Нитевидные нанокристаллы (ННК) на основе полупроводниковых соединений АЗБ5 являются перспективным материалом современной оптоэлектроники. При формировании ННК по механизму пар-жидкость-кристалл, использование катализатора – как правило, капель Au, позволяет легче контролировать морфологию массивов ННК. Но, материал катализатора может встраиваться в решетку растущего ННК, из-за чего образуются дефекты с глубоким уровнем, что уменьшает время жизни носителей заряда и приводит к безызлучательной рекомбинации. Рост самокаталитических ННК, используя элемент III-группы самого ННК (например, Ga для GaP) исключает загрязнение АЗБ5 соединений, но сокращает диапазон ростовых параметров.

Целью данной работы было определить влияние ростовых условий (температуры подложки, величины и отношения молекулярных потоков) и методов физико-химической подготовки подложки Si(111) на поверхностную плотность (ПП), форму и размеры самокаталитических ННК GaP формирующихся в процессе молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках Si (111). Морфология массивов ННК исследовалась методами сканирующей электронной микроскопии.

Установлено, что ПП ННК немонотонно зависит от отношения потоков V/III групп – для каждой выбранной ростовой температуры существует оптимальное отношение V/III при которой наблюдается максимальная ПП ННК. Так, при $T_{\text{роста}} = 630$ °С увеличение отношения V/III с 12 до 18 приводит к увеличению ПП ННК с 0.07 до 0.32 мкм⁻², в то время как дальнейшее увеличение отношения V/III до 30 приводит к падению ПП с 0.32 до 0.17 мкм⁻². Определено, что на морфологию массивов ННК существенно влияет структура поверхностного окисла подложки – модификация процедуры очистки поверхности подложек по методу Шираки и выбор оптимальной температуры отжига позволяет увеличить ПП ННК с 0.32 до 1.08 мкм⁻².

Структурные исследования прекурсоров для синтеза эндоэдральных металлофуллеренов железа

Н. С. Фокин¹, А. А. Борисенкова^{1, 2}, В. П. Седов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Уникальная структура эндоэдральных металлофуллеренов, благодаря наличию инкапсулированного атома металла, вызывают большой интерес в связи с перспективностью их использования в биомедицине [1, 2]. Кроме того, эндометаллофуллерены переходных металлов, таких как Fe, Co, Ni, Mn и др., вызывают научный и практический интерес в связи с наличием у них таких свойств, как парамагнетизм и переменная валентность.

Однако в настоящее время сведения о возможности получения эндометаллофуллеренов переходных металлов в электрической дуге достаточно противоречивы. Данные, полученные при расчетах методом молекулярной динамики, показали возможность протекания процессов образования эндоэдральных структур (фуллеренов и нанотубок с железом), обладающих высокой термодинамической и кинетической устойчивостью [3]. Другие авторы утверждают, что образование эндоэдральных металлофуллеренов железа в электрической дуге невозможно из-за слабой связи Fe-C, образующейся в электрической дуге [4].

В данной работе в качестве прекурсора для синтеза эндоэдральных металлофуллеренов железа использовался пиролизат фталоцианина железа, полученный пиролизом при $T = 880$ °С. Структура фталоцианина и пиролизата была исследована с помощью ИК-спектроскопии, EXAFS – спектроскопии и рентгеновской дифракции.

1. Okimoto Haruya, Shinohara Hisanori. Carbon Materials for Biological Use. Applied Research on Endohedral Metallofullerene as Contrast Agent for MRI // Chemistry & Chemical Industry. 2006. V. 59. No. 10. P. 1056–1059.
2. Erick B. Iezzi *et al.* Lutetium-based Trimetallic Nitride Endohedral Metallofullerenes: New Contrast Agents // Nano Letters. 2002. V. 2. No. 11. P. 1187–1190.
3. Г. А. Домрачев. Роль углерода и металла в самоорганизации системы железо-углерод при различном содержании компонентов // ФТТ. 2004. Т. 46. Вып. 10. С. 1901–1915.
4. Q. Deng *et al.* Self-assembly of endohedral metallofullerenes: a decisive role of cooling gas and metal-carbon bonding // Nanoscale. 2016. No. 8. P. 3796–3808.

Исследование электронной структуры наноструктур ZnS:Cu, полученных методом электроосаждения

А. И. Чукавин^{1, 2}, Р. Г. Валеев¹, А. Н. Бельтюков¹, М. Ю. Пивоварова²

¹ *Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

² *Ижевский государственный технический университет им. М. Т. Калашикова, Ижевск, Россия*

Сульфид цинка обладает высоким показателем преломления и коэффициентом пропускания в видимом диапазоне спектра, что позволяет применять его в различных оптоэлектронных устройствах таких, как солнечные элементы, сенсоры и других [1]. Легированный медью сульфид цинка традиционно применяется в качестве активного элемента в электролюминесцентных источниках. Подходы к синтезу ZnS также различны и зависят от конкретных применений. Методы получения в виде тонких пленок и наноструктур ZnS в основном включают химическое осаждение, гидротермальный метод, термическое испарение [2], электроосаждение. Получение наноструктур с использованием электрохимического осаждения позволяет получать высококачественные материалы, пригодные для многих применений [3]. Среди достоинств метода можно выделить относительную простоту и низкую стоимость производства, возможность выращивания покрытий на больших площадях, в том числе и на заготовках сложной формы. Однако для контролируемого роста наноструктурированных материалов необходимо понимание электрохимических процессов и контроль многих параметров.

В данной работе электронная структура наноструктур ZnS:Cu полученных методом электроосаждения исследовалась при помощи рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Получены зависимости зарядовых состояний элементов от условий синтеза таких, как температура синтеза, потенциал электрохимического осаждения, состав электролита, температура отжига образцов. Из данных УФ/ВИД-спектроскопии определена ширина запрещенной зоны наноструктурированного сульфида цинка.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (№ гос. регистрации № АААА-А17-117022250040 0).

1. X. Wang, H. Huang, Bo Liang *et al.* Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. 38(1), 57–90 (2013).
2. R.G. Valeev, D.I. Petukhov, A.I. Chukavin, A.N. Beltiukov. Semiconductors, 50(2), 266–270 (2016).
3. Kh. Ghezali, L. Mentar, B. Boudine, A. Azizi. J. Electroanal. Chem., 794, 212–220 (2017).

Рентгенодифракционные исследования образцов $\text{LiFePO}_4\text{:C}$ для литий-ионных аккумуляторов

М. Д. Шарков, М. Е. Бойко, А. М. Бойко, А. В. Бобыль

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

На лабораторной установке BRUKER D8 DISCOVER получены кривые рентгеновской дифрактометрии (РД) от серии образцов $\text{LiFePO}_4\text{:C}$ при дублетном $\text{Co K}_{\alpha 1,2}$ -излучении. Кристаллы LiFePO_4 имеют орторомбическую решетку группы Pnma (№62) [1].

На первой стадии обработки была проведена фильтрация измеренных кривых с помощью Фурье-анализа. Длины волн линий дублета и соотношение интенсивностей взяты из литературы [2, 3]. Далее из набора полученных кривых РД были определены параметры решетки $a = 10.328 \text{ \AA}$, $b = 6.007 \text{ \AA}$, $c = 4.694 \text{ \AA}$. Затем из профильтрованных кривых вычитались фоновые компоненты, аппроксимированные функцией-полиномом от величины q^{-1} (где q – волновой вектор, отвечающий рассеянию синглетного $\text{Co K}_{\alpha 1}$ излучения).

Был проведен анализ дифрактограмм по методу Вильямсона – Холла [4]. В таблице приведены результаты анализа – размер области когерентного рассеяния (ОКР) и микродеформация – для рефлексов в направлениях [200], [101], [210], [011]. Выбор направлений обусловлен тем, чтобы в каждом из них присутствовали по крайней мере два рефлекса, не образующих единого пика с соседними рефлексами.

Таблица. Обработка данных РД методом Вильямсона – Холла от образцов 1–5 LiFePO_4

Направление	[100]	[101]	[210]	[011]
Образец 1, ОКР	71	92	69	87
Образец 1, микродеф.	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-2}$	$2.3 \cdot 10^{-2}$	$2.0 \cdot 10^{-2}$
Образец 2, ОКР	97	231		85
Образец 2, микродеф.	$2.1 \cdot 10^{-2}$	$3.2 \cdot 10^{-2}$		$2.4 \cdot 10^{-2}$
Образец 3, ОКР	114	53	82	55
Образец 3, микродеф.	$5.5 \cdot 10^{-2}$	$2.3 \cdot 10^{-2}$	$2.9 \cdot 10^{-2}$	$3.1 \cdot 10^{-2}$
Образец 4, ОКР	99	208	200	298
Образец 4, микродеф.	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$2.7 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-2}$
Образец 5, ОКР	53	62	64	63
Образец 5, микродеф.	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$2.3 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-2}$	$2.1 \cdot 10^{-2}$

Таблица показывает, что в каждом из образцов 1 и 5 величины ОКР в направлениях [100], [101], [210], [011] близки друг к другу: около 80 \AA для образца 1 и 60 \AA для образца 5. Для образцов 2 и 3 величина ОКР выше – 230 и 110 \AA в направлениях [101] и [100] соответственно. Оба эти направления перпендикулярны направлению [010] и, следовательно, лежат в плоскости (010). Вероятно, на анизотропию зерен в образцах 2 и 3 влияет слоистая структура атомной матрицы LiFePO_4 в плоскости (010) [1]. Наконец, в

образце 4 достигаются наибольшие величины ОКР (от 100 до 300 Å) и наибольшая (3-кратная) анизотропия. В целом из таблицы можно сделать вывод о двух тенденциях формы зерен LiFePO_4 – к вытягиванию вдоль плоскости атомных слоев (010) и увеличению размеров в направлениях, близких к [001].

1. G. Liang, K. Park, J. Li, R.E. Benson, D. Vaknin, J.T. Markert, M.C. Croft. Phys. Rev. B 77, 064414 (2008).
2. J.A. Bearden. Rev. Mod. Phys. 39(1), 78 (1967).
3. И. С. Григорьев, Е. З. Мейлихов (ред.) Физические величины (справочник). М.: Энергоатомиздат, 1991.
4. G.K. Williamson, W.H. Hall. Acta Metall. 1, 22 (1953).

Получение и исследование структуры и свойств нанопокровтий кобальта, полученных на поверхности мембран пористого анодного оксида алюминия

Р. Г. Валеев¹, А. И. Чукавин¹, А. Н. Бельтюков¹, А. С. Алалыкин^{1, 2}

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

² Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

Кобальт, железо, никель, другие 3d металлы, их сплавы и соединения с интерметаллидами традиционно используются как в качестве катодов при электролитических реакциях выделения водорода (РВВ) в процессе электролиза из кислых и щелочных водных растворов [1], так и в магнитных приложениях [2, 3]. Нанокристаллический Со обладает широким перечнем структурных, магнитных, электронных и каталитических свойств, зависящих от размера. В частности, экспоненциальная зависимость времени релаксации намагниченности от объема стимулировала интенсивные исследования синтеза нанокристаллов Со для магнитных носителей информации [4]. Также большое влияние оказывают структурно-фазовое состояние и электронная структура, обуславливающие химическую и магнитную активность кобальта.

Целью данной работы является разработка методики осаждения кобальта на высокоразвитую поверхность мембран пористого анодного оксида алюминия для получения покрытий, состоящих из упорядоченно-расположенных наночастиц одинакового размера. Проведено исследование морфологии, структурно-фазового состояния и электронной структуры, магнитных и магнитооптических свойств полученных образцов в зависимости от параметров пористой структуры пористого Al_2O_3 .

Работа выполнена с использованием приборной базы ЦКП УдмФИЦ УрО РАН «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН (поддержан Минобрнауки РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы, (уникальный идентификатор проекта RFMEFI62119X0035)) в рамках Госзадания отдела Физики и химии поверхности УдмФИЦ УрО РАН (№ гос. регистрации АААА-А17-117022250040-0).

1. L.A. Kibler, Chem. Phys. Chem. 7, 985 (2006).
2. И. В. Росляков, К. С. Напольский, А. А. Елисеев и др., Российские нанотехнологии 4, 2009, 69–72.
3. A.P. Chumakov, S.V. Grigoriev, N.A. Grigoryeva *et al.* Physica B 406, 2011, 2405–2408.
4. V.F. Puentes, K.M. Krishnan, A.P. Alivisatos, Science, 291, 2115 (2001).

Сравнительные результаты ионно-жидкостной экстракционной очистки керосиновой фракции

Г. Дж. Гусейнов

*Институт нефтехимических процессов им. акад. Ю. Г. Мамедалиева НАН Азербайджана,
Баку, Азербайджан*

Проблема охраны окружающей среды диктует необходимость очистки нефтяных фракций и производства качественных нефтепродуктов, в том числе керосина различного назначения. С целью удаления канцерогенных ароматических углеводородов, керосин подвергается селективной очистке методами гидроочистки, кислотно-контактной очистки или же методом экстракционной очистки с применением различных органических растворителей.

В последние годы с целью создания экологичных технологий, отвечающих требованиям «зеленой химии» в процессах нефтехимического синтеза и нефтепереработки, в частности экстракционной очистки нефтяных фракций взамен токсичным органическим растворителям предпочтение отдается использованию так называемых ионных жидкостей – низкоплавких солей органических кислот с аминами.

С учетом сказанного нами исследована экстракционная очистка керосиновой фракции с температурой кипения 136–240 °С с содержанием ароматических углеводородов 12 % масс с использованием в качестве избирательного растворителя ионных жидкостей на основе уксусной кислоты и диэтиламина, морфолина или N-метилпирролидона. Процесс осуществлен при комнатной температуре (20–25 °С) в одну стадию при массовом соотношении керосиновой фракции к ионной жидкости – 1:2 или поэтапно при равном соотношении и времени контакта компонентов 1 час на каждой стадии.

Проведенным циклом исследований установлено, что высокая степень деароматизации керосиновой фракции достигается в случае использования в качестве избирательного растворителя N-метилпирролидонацетата. При этом выход рафината с остаточным содержанием ароматических углеводородов 1,0 % мас. составляет 85,0 % мас. против рафинатов с выходом 86,3 % мас. и 84,5 % мас. и содержанием остаточной ароматики 4 и 3 % мас. соответственно при экстракционной очистке морфолинацетатом и диэтиламинацетатом.

Перспективность ионно-жидкостной экстракционной очистки обеспечивается также легкой регенерируемостью и возможностью неоднократного повторного применения в качестве экстрагента с той же эффективностью.

Сравнительные результаты ионно-жидкостной экстракционной очистки керосиновой фракции.

Polarization switching in undoped and La – doped TlInS₂

V.B. Aliyeva

Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan

In a broad family of ferroelectric crystals, which possess spontaneous polarization reoriented by the electric field, there is one which has played an especially important role in the physics of ferroelectricity in general. It is the ternary thallium indium disulphide – TlInS₂, heferroelectric – semiconductor crystal with layered structure with monoclinic space group C_{2h}^6 at room temperature. The intensive research of various physical properties of this crystal during the past recent 40 years has led to an understanding of the mechanism of structural phase transitions in the materials which contain ferroelectric and semiconductor properties simultaneously as well as to new ideas related with the combination of the two branches: semiconductor physics and ferroelectricity.

This work was to investigate the presence of the ME on ferroelectric hysteresis loops in TlInS₂:La. Additionally, we report the effect of the illumination of crystal by photoactive light with various wavelengths on P - E dependences in TlInS₂: La. A further was to study the influence of preliminary application of dc electric field to the crystal during cooling at different temperature ranges on P - E dependence of TlInS₂: La were also the aim of this work.

Dielectric hysteresis loops of pure and lanthanum doped TlInS₂ ferroelectric – semiconductors were studied at the frequency 50 Hz for different temperatures below the Curie temperature (T_C). It has been revealed that, without any poling procedure, pure TlInS₂ exhibits normal single hysteresis loops at $T < T_C$. After electric field - cooled treatment of TlInS₂ the shape of hysteresis loops was strongly affected by corresponding charged deep level defects which were previously activated during the poling process. As a result, an additional defect polarization state from space charges accumulated on the intrinsic deep level defects has been revealed in pure TlInS₂ at the temperatures below. Besides, unusual multiple hysteresis loops were observed in La doped TlInS₂ at $T < T_C$ after application of different external perturbations (electric field, exposition and memory effect) to the sample. Measurements of the hysteresis loops in TlInS₂:La revealed the slim single, double and even triple polarization – electric field (P – E) hysteresis loops. This intriguing phenomenon is attributed to the domain pinning by photo – and electrically active La – impurity centers. The temperature variation of double - hysteresis loop was also investigated. Due to the heat elimination of the random local defect polar moments, the double – hysteresis loops were transformed into a normal single hysteresis loops on increasing the temperature.

Photoluminescence study of undoped ZnGa₂S₄ compound

S.G. Asadullayeva

Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan

AB³C⁶₄ ordered vacancy compounds are a family of tetrahedral semiconductor, which ZnGa₂Se₄ belongs to the group (where A-divalent cations of Zn, Cd; B-trivalent cations of Ga, In, Al, but C-chalcogens of S, Se, Te). Presence of birefringence, optical activity, wide band gap, bright luminescence, high sensitivity is characteristic of these compounds [1–4]. Above-mentioned properties propose these compounds to be prospective materials for semiconductive optoelectronics. Physical properties also luminescent, optical, photoelectric and other properties of ZnGa₂S₄ comparing with other compounds of group AB³C⁶₄ have not been studied yet. Investigation of the optical properties is very interesting from this perspective.

The emission of the samples were excited by 325 nm wavelength laser beams. Figure shows the photoluminescence spectrum of the three-band white LED the ZnGa₂S₄. Three distinct emission peaks can be seen at 430, 530 and 675 nm, which are the blue emission from the blue LED, the green and red emission from ZnGa₂S₄. Taking into account the fact that the forbidden band is 3.6 eV [2], we can say that the luminescence maxima observed are related to donor acceptor recombination.

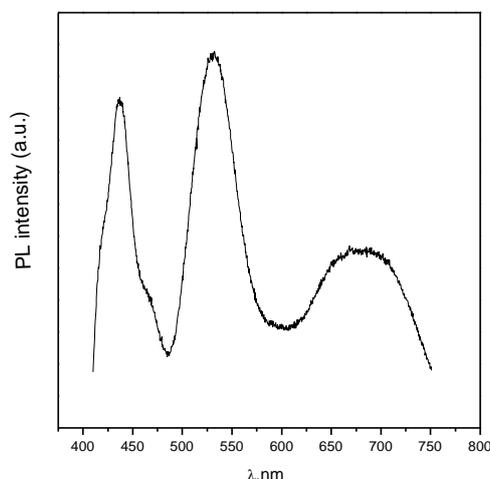


Fig. PL emissions spectrum of ZnGa₂S₄ at room temperature (300 K)

Since PL investigation of ZnGa₂S₄ usually performed for rare-earth doped samples and obtained PL emission peaks explained due to the electronic transitions of rare-earth ions. But in this study we are shown that even undoped ZnGa₂S₄ compound have intense PL emission in the visible range of the wavelength which it can be suitable for white LEDs.

1. Tagiyev O.B., Asaduulayeva S.G., Eyyubov G.Y., Kasumov U.F., Tagiyev K.O. (2012). Photoluminescence compounds ZnGa₂Se₄ and ZnGa₂Se₄:Eu²⁺. *Journal of modern physics*, 3(08), 827–830.

2. Jagrati S., Pancham K., Amit S. (2017). Structural and optical investigations of ZnGa_2X_4 (X = S, Se) compounds for solar photovoltaic applications. *Materials Chemistry and Physics*, 199, 257–264.
3. Tagiyev B.G., Tagiyev O.B., Asadullayeva S.G. (2011). Current-voltage characteristics of ZnGa_2Se_4 compound polycrystals. *Semiconductors*, 45(1), 52–55.
4. Hahn H., Frank G., Klingler W., Stoerger A., Stoerger G. (1955). Studies on ternary chalcogenides. About some ternary chalcogenides with chalcopyrite structure. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 279, 241–270.

The acoustic wave velocity of TlInSe₂

N.A. Ismayilova

Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan

The bulk and surface acoustic wave velocities of TlInSe₂ semiconducting material were studied by implementing density functional theory. The structural parameters and the elastic constants used in this work are taken from our previous paper published in [1]. Sound wave propagates through a solid by three acoustical modes. Hence, there are three types of velocities exists, one is the longitudinal wave velocity (V_1) and others two are the transverse waves velocities (V_{t1}, V_{t2}). Direction dependent ultrasonic velocities in tetragonal crystals can be described as function of the elastic constants C_{ij} as follows [2]. Our obtained values of the longitudinal-wave mode speed (V_1 and transverse-wave mode speed V_{t1}, V_{t2} in this compound propagating in [100], [110] and [111] directions for different values of applied pressure up 20 GPa are given in Table 1. As seen from this table, V_1 are fastest along [100] direction and the shear waves are slowest along this direction. There is no theoretical or experimental data of the sound velocities for major directions at high-pressure have appeared anywhere in literature to compare our results. Therefore, this work can be used as a reference for any further experimental or theoretical study of this compound.

Direction	velocity, <i>m/san</i>	Polarization	0GPa	10GPa	20GPa
[100]	v_l		3121	4239	4948
	v_{t1}	[010]	1503	2549	3077
	v_{t2}	[001]	1610	2073	2135
[110]	v_l		2988	4293	5068
	v_{t1}	[-110]	1753	2457	2873
	v_{t2}	[001]	1610	2073	2135
[111]	v_l		3119	4187	4780
	v_{t1}	[11-1]	1896	2336	2650
	v_{t2}	[1-10]	1594	2278	2636

1. Azerbaijan Journal of Physics V. XXIII, No. 4. 2017, p. 14.
2. Dieulesaint E. and Royer D., New York: Wiley: Applications to Signal Processing. Elastic Waves in Solids, 1980, 511 p.

Crystal structure determination of Pigment Orange 68 from X-ray powder diffraction data

S.N. Ivashevskaya¹, J. van de Streek², M.U. Schmidt²

¹ *Institute of Geology of the Karelian Research Centre of the Russian Academy of Sciences,
Petrozavodsk, Russia.*

² *Institute for Inorganic and Analytical Chemistry, Frankfurt University,
Frankfurt am Main, Germany*

Crystal structures of Pigment Orange 68 ($\text{Ni}(\text{C}_{29}\text{H}_{18}\text{N}_4\text{O}_3)$, α - and β -phases) were determined from laboratory X-ray powder diffraction data by simulated annealing method using the program *DASH* [1] followed by Rietveld refinement with *TOPAS* [2]. The reason lies in the very low solubility of the pigment in all solvents, impeding the growth of single crystals suitable for X-ray analyses. We had not powder diffraction pattern of Pigment Orange 68 from single phase: the pattern of α -phase contains reflections from the β -phase and the pattern of β -phase contains reflections from the α -phase. Nevertheless, crystal structures of both phases were determined.

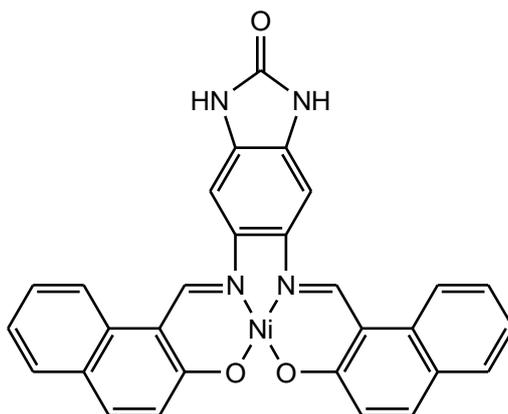


Fig. Chemical diagram of Pigment Orange 68

The crystal structures of the α - and β -phase are very similar. In both polymorphs the molecules are situated on a centre of symmetry. Both forms contain virtually the same infinite chains of hydrogen bonds across centres of symmetry, which in both forms assembly into layers. The only difference is the relative arrangements of the infinite chains of hydrogen-bonds.

α -P.O. 68	β -P.O. 68
$a = 14.717(4) \text{ \AA}$, $b = 7.444(2) \text{ \AA}$, $c = 22.269(3) \text{ \AA}$, $\beta = 116.92(1)^\circ$, $V = 2175.31(1) \text{ \AA}^3$, $P2_1/c$, $Z = 4$	$a = 13.791(1) \text{ \AA}$, $b = 7.844(3) \text{ \AA}$, $c = 20.816(1) \text{ \AA}$, $\beta = 107.93(2)^\circ$, $V = 2142.7(2) \text{ \AA}^3$, $P2_1/c$, $Z = 4$

1. David W.I.F., Shankland K., van de Streek J., Pidcock E., Motherwell S. & Cole J.C. (2006). *J. Appl. Cryst.* 39, 910–915.
2. Coelho A.A. (2007) *TOPAS-Academic 4.1 Version 4.1.*

Electrically conductive nanocomposites based on CNTs synthesized by Arc-Discharge method

S.A. Mammadova, R.Q. Abaszade

Institute of Physics of ANAS, Baku, Azerbaijan

The need of fabrication new generation smaller, cheaper, lighter nanodevices, demands the replacement of metal parts with polymer composites due to advantages such as light weight, corrosion resistance, easy of processing and lower manufacturing costs. These type of nanocomposites have a wide range of properties and applications, especially in electronics, aerospace science, valuable household items, electromagnetic absorption devices, industry etc.

This paper present the research work results devoted to the synthesis of qualitative carbon nanotubes by Arc-Discharge method and investigation their application ability in nanocomposite technology, particularly, investigation electrical conductivity properties of nanocomposites-1,2,4,8% CNT/epoxy composites. CNTs were synthesized by Arc-Discharge method in a stable current. For this purpose, the mixture of 1% Y_2O_3 and 4% Ni was used as catalyst and 95% mass of C as a carbon source of carbon. The mixture of these catalysts and carbon source was used as anode for synthesis of carbon nanotubes. The synthesis process was carried out in an Ar (100mbar) environment.

SEM microscopy analysis prove that nanometer sized (diameter of CNTs), tubular form tangled CNTs were synthesized. As polymer matrix we have used epoxy resin due to their reactivity that enables them to bond well to fibers and their toughness-are the thermoset resins that, combined with glass, carbon or aramid fibers, produce composites with the best properties of most thermosets. CNT/epoxy composites have been prepared using two-factor mechanical method and electrical properties of these composites have been studied [1, 2]. For preparation nanocomposites, different concentration (1, 2, 4, 8 % percentage) of CNTs were used for detail investigation of electrical conductivity of CNT/epoxy composites. The current-voltage (I-V) characteristics of 1, 2, 4, 8 % CNT/epoxy composites show that 1 % and 2 % CNTs based composites are not electrical conductive while 4 % and 8 % CNT/epoxy composites are electrically conductive.

1. A.B. Huseynov, A.O. Israfilov, S.A. Mammadova *et al.* Journal of Composite Materials, 1–15 (2019).
2. S.H. Abdullayeva, S.A. Mammadova, A.O. Israfilov, A.B. Huseynov // 15th International Conference on “Technical and Physical Problems of Electrical Engineering” Istanbul Rumeli University (2019).

Forming of mixed area between TiO₂ and SiO₂ layers after ion irradiation

T.V. Phuc^{1, 2, 3}, M. Kulik^{3, 4}, L.H. Khiem^{1, 2}, P.L. Tuan^{3, 5}

¹ Graduate University of Science and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, Cau Giay, Hanoi, Vietnam

² Institute of Physics, Ba Dinh, Hanoi, Vietnam

³ Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

⁴ Institute of Physics, Maria Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

⁵ Vietnam Atomic Energy Institute, Hoan Kiem, Hanoi, Vietnam

Influence of mass and energy of the implanted ion on the mixing process of TiO₂ (62 nm) / SiO₂ (124 nm) interfaces were investigated using RBS method. The specimens were irradiated with the noble gas ions Ne⁺, Ar⁺, Kr⁺, Xe⁺ at different energies of 100, 150, 200, 250 keV. The irradiation was carried out at the room temperature with the fixed value of the ion fluence at 3×10^{16} [ions/cm²]. The RBS method was used for determining the elemental depth profiles of the samples. The 1.5-MeV He⁺ ion beam was directed to the samples under the incident angle 60° towards the normal of the sample surface. The RBS spectra were collected at a scattering angle of 170° away from the beam incident direction. The primary parameters that are measurable by the experimental technique are used to characterize the mixing process. Shifting of the Ti, Si energy edges from RBS spectra indicated to the mixing of the atoms across the interface of TiO₂/SiO₂ systems that lead to forming of the transition area between the layers. Mixing amount was quantified by changing thickness of transition layers well as the TiO₂ layers which was correspond to variation FWHM of the Ti peaks. It was found that when the ion energy become higher the FWHM values decrease associated with linear increasing thickness of the transition layers. The influence of ion mass on changes in the thickness of the transition layers, however, is not described by a linear relation. In this case, for samples implanted with ions of different energy, the growth rate is different. The maximum mixing was observed for the case of 250-Xe⁺ ion implantation. The Monte Carlo simulation was performed using SRIM code for understanding as well as explanation of these effects based on the depth-dependent damages and the defect concentration profiles.

**Микроконтейнеры для интраназальной доставки
пептидного препарата «Кортексин»**

А. В. Бусленко¹, Г. С. Плотников², Д. Б. Трушина³, Т. В. Букреева^{2, 3}

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

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

³ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН,
Москва, Россия*

Интраназальное введение является перспективным способом доставки препаратов непосредственно в центральную нервную систему. Для увеличения биодоступности доставляемых веществ предложено использовать микроконтейнеры на основе пористых частиц карбоната кальция с мукоадгезивной оболочкой [1]. В настоящей работе проводили загрузку микрочастиц CaCO_3 пептидным препаратом «Кортексин». Наибольшая загрузка частиц CaCO_3 «Кортексином» достигнута с использованием методики соосаждения и составляет $9,0 \pm 0,6$ мас. %. Изученные параметры контейнеров (средний размер, загрузка, мукоадгезивная оболочка) свидетельствуют об их перспективности для интраназальной доставки препарата.

1. Букреева Т. В. и др. // ДАН. 2011. Т. 440. № 2. С. 191.

Разностная схема для расчета переноса загрязнений в мелком водоеме

Р. Э. Гасанов

Институт систем управления НАНА, Баку, Азербайджан

Рассмотрим численный алгоритм расчета гидродинамики течения и распространения загрязнений в мелких водоемах со сложной конфигурацией берегов при наличии притоков и островов в русле. Течение воды в открытом водоеме при постоянной глубине потока описывается системой дифференциальных уравнений, записанных в естественных переменных для двумерных течений.

Уравнение переноса загрязнений в потоке жидкости в безразмерном виде в декартовой системе координат с учетом зависимости коэффициента диффузии $\mu = \mu_0 \bar{\mu}(x, y)$ от координат можно записать так:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u \phi}{\partial x} + \frac{\partial v \phi}{\partial y} = \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right), \quad (1)$$

где число Пекле $Pe = \frac{V_0 L}{\mu_0}$, μ_0 – характерное размерное значение коэффициента диффузии загрязнения в воде. Рассмотрим течение жидкости в русле, если имеет место граничное условие для концентрации загрязнений $\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0$ на берегах русла (рис. 1).

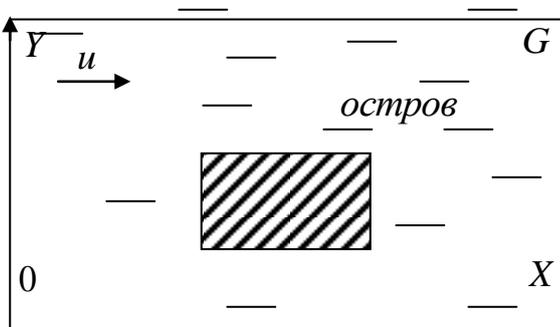


Рис. 1. Схема акватории водоема с островом

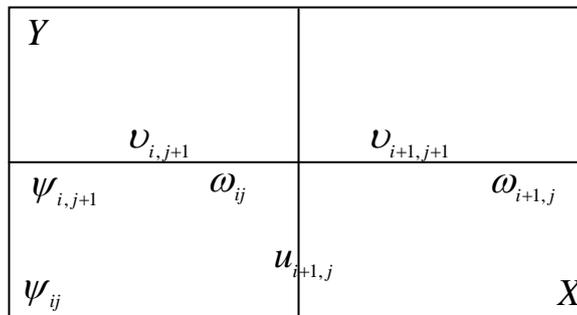


Рис. 2. Схема разнесенной сетки для расчета течений жидкости в переменных ψ, ϕ

На входе в русло полагаем степени загрязнения жидкости известной. На выходе из русла в силу того, что уравнение (1) параболического типа, граничное условие ставится так, чтобы пренебречь возможной передачей загрязнений за счет диффузии извне расчетной области. Эти условия будут физически достоверны, если границы входа и выхода жидкости расчетной области достаточно удалены от исследуемого вымывания загрязнений на поверхности обтекаемого внутреннего тела (острова) в русле. При численном интегрировании уравнения (1) с граничными условиями второго и третьего родов целесообразно загрязнение ϕ определять в центрах разностных ячеек (рис. 2).

1. Атавин А. А., Васильев О. Ф., Воеводин А. Ф. Методы расчета неустановившихся течений в системах открытых русел и каналов // Численные методы механики сплошной среды. 1975, Том 6, № 4, с. 14–19.
2. Атанов Г. А., Евсева Е. Г. Численный метод решения нестационарных уравнений речной гидродинамики (на англ.) // Численные методы в гидравлике и гидродинамике. Донецк, Дон ГУ, 1994, с. 114.

Исследование изменений молекулярного окружения полярных аминокислот в присутствии нанокристаллического гидроксиапатита

Д. Л. Голощапов, К. А. Никитков, В. Н. Бартнев, П. В. Середин

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Кальцифицированные ткани человека, в частности эмаль и дентин зубов, являются структурно организованными нанокристаллическими композитами с анизотропией структурных и морфологических характеристик [1]. При восстановлении данных тканей нередко возникают проблемы, обусловленные несоответствием состава и отсутствием функциональных связей между синтетическим материалом и нативной тканью. Поэтому актуальными задачами биоматериаловедения представляются получение композитов схожей с биотканями конфигурации, их интеграции, а также определение происходящих при этом фазовых и молекулярных превращений. Ключевым аспектом образования функциональной связи биокомпозитов с различными соединениями на молекулярном уровне является не только наличие свободных боковых связей аминокислот, но и условия протекания процесса, при котором становится возможно поверхностное взаимодействие соединений через определённые функциональные группы [2]. Поэтому для регистрации изменений в молекулярном окружении биокомпозитов, моделирующих эмаль и дентин зубов, в данной работе были получены серии композиционных систем из водных растворов с различной величиной рН, содержащие нанокристаллический гидроксиапатит (ГАП) и полярные положительные аминокислоты L-лизин и L-аргинин [2].

Исследования молекулярного состава образцов, проведенные методом ИК-спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния, показали, что при формировании биокомпозита, содержащего L-лизин и нанокристаллический нестехиометрический гидроксиапатит, происходит перераспределение интенсивности колебательных мод, соответствующих боковым связям L-лизина и ОН-группам гидроксиапатита. Это свидетельствует о химической адсорбции L-лизина на поверхности ГАП в средах с различной величиной рН. В то же время установлено, что взаимодействие L-аргинина с гидроксиапатитом осуществляется за счет механизмов молекулярной ориентации, что отражается на растяжении и деформации колебательных мод NH_3 групп L-аргинина в ИК-спектрах.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант № 18-29-11008 мк) и гранта президента Российской Федерации МК-419.2019.2.

1. Nanci A. Ten Cate's Oral Histology: Development, Structure, and Function. 8th ed. Elsevier Health Sciences, 2013. 400 p.
2. Hernández B., Pflüger F., Derbel N., De Coninck J., Ghomi M. // The Journal of Physical Chemistry B. 2010. V. 114. No. 2. P. 1077. doi 10.1021/jp909517r

Исследование взаимодействия коротких фрагментов ДНК и дипептида Asp-Ser

А. В. Дмитриев¹, А. И. Федосеев¹, Е. В. Саватеева-Попова²,
С. Г. Лушников¹, В. Х. Хавинсон²

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

² Институт физиологии им. И. П. Павлова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Недавние исследования показали, что одним из механизмов ответственным за возникновение нейродегенеративных заболеваний (НДЗ) является конформационная динамика ДНК и белков и/или их нарушения [1]. Было признано недавно, что короткие пептиды в силу их влияния на регуляцию генов могут рассматриваться как основа для разработки новых методов лечения НДЗ. Исследования механизмов такого влияния, показанного на примере сайт-специфического связывания коротких пептидов с гистонами пшеницы, играют ключевую роль в разработке лекарств нового поколения. Одним из методов, который позволяет исследовать локальные конформационные изменения, коллективные возбуждения и т.д. в диапазоне частот от 1 до 1000 ГГц является бриллюэновское рассеяние света. Этот метод активно используется в последнее время для изучения фазовых превращений в биополимерах [2]. В настоящей работе, используя метод бриллюэновского рассеяния света, был проведен анализ упругих свойств растворов ДНК с пептидами в широком диапазоне температур. В качестве дополнительного метода, для определения степени связанности спиралей, был использован метод плавления ДНК с высоким разрешением.

В качестве объекта исследований была выбрана последовательность ДНК длиной 120 п.н. – *agnostic* (*agn^{ts3}*), выделенная из мутантной линии мух тип *Drosophila melanogaster*. Данная мутантная линия характеризуется нарушениями обучения и памяти, что соответствует основным симптомам НДЗ. В качестве пептида использовался дипептид с аминокислотным составом Asp-Ser. Температура менялась от 293 до 367 градусов Кельвина. Для анализа рассеянного света (лазер с длиной волны 488 нм) использовался 3-х проходной пьезосканируемый интерферометр Фабри-Перо. Были получены температурные зависимости сдвига, интенсивностей и ширины на полувысоте бриллюэновских дублетов. Расчет энергий активации и времени релаксации позволил оценить вклад межмолекулярных взаимодействий в динамику коротких участков ДНК в присутствии коротких пептидов.

1. Brazda V. *et al.* BMC Mol. Biol., 2011, 12, 33.

2. Vashchenkov V.E., Fedoshev A.I., Petukhov M.G. *et al.* J. of Phys.: Conference Series, 572, 012015, 2014; Lushnikov S.G., Dmitriev A.V., Fedoseev A.I. *et al.* Письма в ЖЭТФ, 2013, 98(11), 830.

ЭПР-исследования магнитных наночастиц в тканях *Mus albus officinarum*

И. А. Киселев¹, Я. Ю. Марченко¹, М. А. Швецов^{2, 3}, В. А. Рыжов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Center for Translational Cancer Research, Technical University of Munich (TranslaTUM),
Munich, Germany

В настоящее время для исследований в области диагностики и терапии новообразований, в том числе и злокачественных, всё активнее применяются различные магнитные наночастицы. Наличие у них магнитного момента позволяет улучшить контраст в магнитно-резонансной томографии опухолей, а также использовать их в противоопухолевой терапии, в частности, в гипертермии и исследованиях адресности доставки лекарств. Наиболее удобными являются наночастицы суперпарамагнитного оксида железа (СПОЖН), вследствие их биологической нейтральности и низкой стоимости. Используемые в работе СПОЖН, покрытые декстрановой оболочкой для предотвращения их окисления и агрегации, были предварительно охарактеризованы в [1]. В ЭПР-исследованиях применялся спектрометр широких линий, оснащённый балансным резонатором [2]. Были исследованы образцы различных тканей *Mus albus officinarum* (мышь лабораторная). Зарегистрированный ЭПР-сигнал хорошо описывается тремя линиями, одна из которых – лорентциан, а две другие – гауссианы. Гауссовы линии в ЭПР-спектре связаны с наночастицами, что согласуется с их описанием в [1]. Линия же лорентцевой формы, вероятно, связана с обладающими парамагнитными свойствами белками и ферментами, содержащимися в тканях *Mus albus officinarum*. Согласно результатам магнитно-резонансной спектроскопии, распределение СПОЖН неравномерное как по организму в целом, так и в органах по отдельности. Вместе с тем неожиданным результатом явилось то, что в некоторых образцах, взятых у животных контрольной группы, были зарегистрированы ЭПР-спектры, схожие по структуре с спектрами образцов, содержащих СПОЖН.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-08-00024.

1. V.A. Ryzhov, I.A. Kiselev, O.P. Smirnov, Yu.P. Chernenkov, V.V. Deriglazov, L.Y. Yakovleva, B.P. Nikolaev, Yu.V. Bogachev, Ya.Yu. Marchenko, Applied Physics A (2019) 125:322.
2. В. А. Рыжов, Е. И. Завацкий, В. А. Соловьев, И. А. Киселев, В. Н. Фомичев, В. А. Бикинцев, ЖТФ 65, вып. 1, 134–145 (1995).

Анализ хромосомных aberrаций, индуцированных в лимфоцитах периферической крови человека разными типами ионизирующих излучений, с использованием стандартного метафазного метода

А. Е. Нуркасова^{1,2}, П. В. Куцало¹, Е. А. Насонова¹

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

² *Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия*

Изучение проблемы биологического действия ионизирующих излучений с разными физическими характеристиками является весьма актуальным в радиобиологии. Полученные знания необходимы для оценки тяжести радиационного поражения организма и возможных последствий облучения при радиационных авариях и в других случаях неконтролируемого облучения, а также для эффективного планирования лучевой терапии и радиационной безопасности работников атомной энергетики. Реализация программ длительных космических полетов ставит задачу изучения биологического действия тяжелых ионов, составляющих основную часть спектра космического излучения.

Изучение закономерностей летального действия заряженных частиц на биологические объекты в экспериментах на ускорителях позволило выявить природу различий в биологической эффективности ионизирующих излучений электромагнитной природы и ускоренных тяжелых ионов. Структурные (хромосомные) aberrаций считаются наиболее чувствительным индикатором повреждающего действия ионизирующей излучений, а метод учета хромосомных aberrаций в метафазных клетках до сих пор относится к очень немногим методам оценки радиочувствительности микроорганизмов и клеток млекопитающих. Хромосомные aberrации обнаруживаются визуально уже в первом митозе после облучения; большинство из них ведет к утрате генетического материала или несбалансированному набору его в дочерних клетках, что чаще всего приводит к их гибели [1, 2]. На сегодняшний день во многих научных лабораториях проводятся исследования стабильных и нестабильных хромосомных aberrаций в лимфоцитах крови человека с использованием метафазного метода. Данный метод является наиболее информативным количественным и качественным анализом хромосомных aberrаций в радиационной цитогенетике.

1. M. Durante. Biomarkers of space radiation risk. *Rad. Res.* 164 (2005).

2. M. Durante, A. Golubev *et al.* Applied nuclear physics at the new high-energy particle accelerator facilities. *Phys. Rep.* (2019).

Анализ состояния дисульфидных связей в белках методом фотоэлектронной спектроскопии

А. А. Ревегук, З. В. Ревегук, А. И. Кононов, Д. Ю. Усачев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Основной целью этого исследования является разработка нового способа анализа состояния дисульфидных связей в белках. Для достижения этой цели в данной работе проанализированы рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФЭС) ряда цистеинсодержащих белков и модельной структуры – цистеина.

Дисульфидные связи играют важную роль во вторичной и третичной структурах белков. Существуют методы, позволяющие получить информацию о количестве S-S-связей, такие как ЯМР, масс-спектрометрия, электрофорез белков в полиамидном геле, но РФЭС имеет много достоинств по сравнению с этими методами, так как позволяет работать в широком диапазоне концентраций, получить большее количество информации, а также не требует изменения структуры белка реагентами. Так как изначально РФЭС использовалась в качестве метода для анализа твердых тел, на данный момент не существует достаточно полной базы РФЭС-данных для больших биомолекул, таких как белки, и проработанных используемых методик анализа структуры макромолекулярных биообъектов. Эта работа направлена на освещение возможностей техники РФЭС для анализа цистеиносодержащих белков и может быть использована в дальнейшем для биофизических и биологических исследований.

В этой работе представлены РФЭС-спектры БСА, лизоцима, НМГВ и цистина. Образцы были подготовлены с различными показателями рН (от нейтрального до сильнощелочного). Химическое состояние атомов серы в метионине и цистеине интерпретировано в терминах электронной плотности на 2р-уровне серы (S 2p). Степень окисления серы в изученных белках определена методом РФЭС. Каждая степень представляет собой определенное химическое состояние в белке: неповрежденный S-S-мостик, сломанный S-S-мостик, состояние с окислением серы по типу S-OH, состояние с окислением серы по типу S = O.

Финансирование работы: исследования проводились в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» (научный парк СПбГУ). А. И. Кононов выражает благодарность Российскому научному фонду (грант РФФ № 16-13-10090).

1. Sych T.S., Reveguk Z.V., Buglak A.A., Reveguk A.A., Ramazanov R.R., Romanov N.M., Polyanchko A.M., Kononov A.I., Pomogaev V.A., Chikhirzhina E.V., Journal of Physical Chemistry C, 122, 51, 29549–29558 (2019).

Локализация возмущений в линейной однородной модели тепломассопереноса

В. Н. Робук

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В развитие темы обозначенной в работе [1, 2] построены решения линейного однородного параболического уравнения с постоянными коэффициентами, которые описывают локализацию и распад возмущений в простейшей модели тепломассопереноса без участия внешних воздействий.

Одновременно указано на то, что эти решения могут претендовать на роль некоего обобщения фундаментального решения вышеуказанного уравнения.

1. В. Н. Робук, Многопараметрическое решение параболического уравнения, Сб. тезисов Международной конференции «XVIII Харитоновские научные чтения по проблемам физики энергий высокой плотности», стр. 120–121, г. Саров, 19–22 апреля 2016 г.
2. В. Н. Робук, Многопараметрическое решение параболического уравнения, Труды Международной конференции «XVIII Харитоновские научные чтения по проблемам физики энергий высокой плотности», том I, стр. 431–441, г. Саров, 19–22 апреля 2016 г.

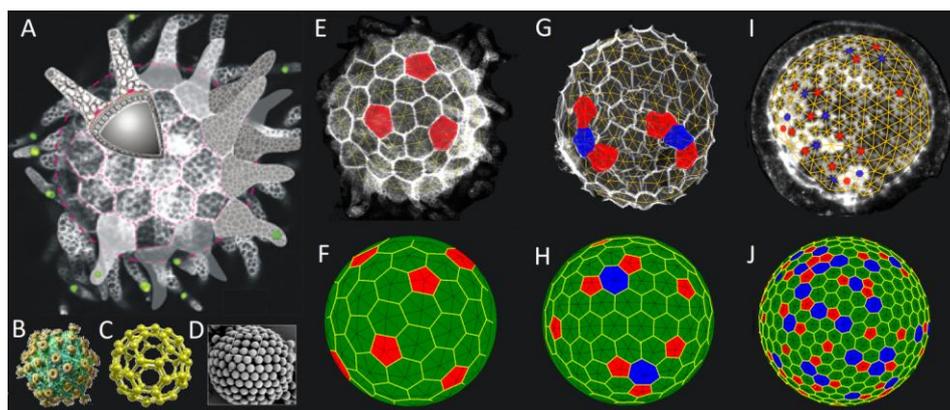
Кристаллический порядок и топологические дефекты в сферических эпителиальных монослоях

Д. С. Рошаль¹, К. Azzag², Е. Le Goff², С. Б. Рошаль¹, S. Baghdiguian²

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

² Université Montpellier, Montpellier, France

Топологические, геометрические и физические методы широко применяются в исследованиях морфологии и онтогенеза разнообразных биообъектов. Мы применяем эти универсальные методы к задаче об упаковке клеток в сферических эпителиальных монослоях, покрывающих яйца асцидий (рис. А, Е, G, I). Данные клеточные монослои подобны хорошо изученным абиотическим двумерным структурам и вирусным оболочкам (рис. В–D), тем не менее, эпителий демонстрирует большее количество топологических дефектов. Мы объясняем этот результат разбросом в размерах эпителиальных клеток и проверяем нашу гипотезу, рассматривая самосборку частиц разных случайных размеров на сферической поверхности.



*Рис. А – строение яйца одного из представителей вида асцидий *Ciona instestinalis*; В–D – похожие сферические упаковки в вирусах [1, 2], фуллеренах и сферических коллоидных кристаллах [3]; Е, G, I – микрофотографии *Ciona instestinalis*, *Ascidiella aspersa* и *Styela plicata*; F, H, I – модельные структуры с дефектами, похожими на те, которые наблюдаются в сферических эпителиальных монослоях, показанных на верхних панелях*

Рубцы, складки и другие сложные дефекты, впервые обнаруженные нами на микрофотографиях яиц асцидий, могут играть существенную роль в постоянном обновлении и реорганизации эпителия, который формирует или выстилает многие ткани и органы многоклеточных организмов. Они также могут быть предвестниками процессов апоптоза, некроза или деления клеток.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-32-90134).

1. Konevtsova O.V., Roshal D.S. *et al.* Soft matter, 15, 7663 (2019).
2. Roshal D. *et al.* Scientific reports, 9, 1 (2019).
3. Roshal D.S. *et al.* Phys. Rev. E, 94, 052605 (2016).

Обнаружение магнетосомоподобных структур в эукариотических клетках

В. А. Рыжов¹, G. Multhoff², М. А. Шевцов^{2, 3}, И. И. Ларионов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Technische Universität München (TranslaTUM), Munich, Germany

³ Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

Хотя магнетосомы в бактериях были открыты несколько десятилетий назад [1, 2], до сих пор остаётся открытым вопрос существуют ли подобные биоминерализованные структуры в эукариотических клетках. В данной работе представлены доказательства существования магнетосомо-подобных структур на основе Fe в различных жизнеспособных эукариотических клетках. Использовалась оригинальная методика регистрации второй гармоники намагниченности продольного нелинейного отклика $M_2(H)$ на слабое ac магнитное поле в зависимости от величины dc поля H [3]. Особенности зарегистрированных сигналов ((i) экстремумы в слабом поле в обеих фазовых компонентах отклика $\text{Re}M_2(H)$ и $\text{Im}M_2(H)$, (ii) разные знаки этих сигналов, и (iii) полевой гистерезис) являются «отпечатками пальцев» присутствующих в клетках магнитных наночастиц [3], входящих, по-видимому, в магнетосомо-подобные структуры. Влияние контактов клеток на состояние этих структур изучалось на клеточных культурах в суспензии и в осадке. Отличие полевого (H -) гистерезиса $\text{Re}M_2(H)$ сигналов от данных образцов предполагает такое влияние. Зависимости H -гистерезиса M_2 отклика от частоты сканирования H свидетельствуют о многодоменном состоянии таких структур в некоторых типах клеток, и однодоменном состоянии в других клеточных линиях. Оценки показывают, что количество магнетосом в клетках составляет $\leq 5 \div 8$ магнетосом на клетку в двух клеточных линиях, дающих наибольший сигнал и $\leq 1 \div 2$ магнетосом/клетку во всех остальных. Присутствие магнетосомоподобных структур изучалось также в нормальных тканях, полученных от крыс породы Wistar и мышей линии C57Bl/6. Дополнительно исследовались ткани опухоли (ортотопическая С6 глиома крысы и GL261 глиома мыши), в них также было обнаружено присутствие магнетосом. Сигналы от определенных тканей (мозг, сердце, лёгкие) соответствовали наночастицам магнетита в однодоменном состоянии, для других органов характеристики M_2 отклика лучше соответствовали Fe(0) составу их магнитного ядра в многодоменном состоянии.

Работа была поддержана грантом РФФИ 19-08-00024 и грантом ID 277386067 Британского совета в рамках Российско-Британского партнерства.

1. D.A. Bazylinski, R.B. Frankel, Nat. Rev. Microbiol. 2, 217 (2004).
2. R. Blakemore, Science. 190, 377 (1975).
3. V.A. Ryzhov, I.V. Pleshakov *et al.*, Appl. Magn. Reson. 45, 339 (2014).

Диаграмма Коула – Коула электрического модуля сыворотки крови больных хроническим лимфолейкозом

Ж. А. Сальникова¹, Л. В. Плотникова², А. П. Смирнов¹, Р. А. Кастро¹,
А. Д. Гарифуллин³, А. Ю. Кувшинов³, С. В. Волошин^{3,4,5}, А. М. Поляничко^{2,6}

¹ Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия

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

³ Российский научно-исследовательский институт гематологии
и трансфузиологии ФМБА России, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Военно-медицинская академия им. С. М. Кирова, Санкт-Петербург, Россия

⁵ Северо-Западный государственный медицинский университет им. И. И. Мечникова
Минздрава РФ, Санкт-Петербург, Россия

⁶ Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия

В работе проводится сравнение результатов диэлектрических спектров (ДС) сыворотки крови больных хроническим лимфолейкозом [1] (пациентов) и здоровых доноров. Исследовали частотные зависимости вещественной $M'(f)$ и мнимой $M''(f)$ частей электрического модуля. Измерения проводили на диэлектрическом спектрометре “Novocontrol Concept 81” в диапазоне частот 10^6 – 10^9 Гц. при комнатной температуре. Диаграмма Коула – Коула для электрического модуля, т. е. зависимость $M''(M')$ наглядно демонстрирует отличие ДС сыворотки крови доноров и пациентов.

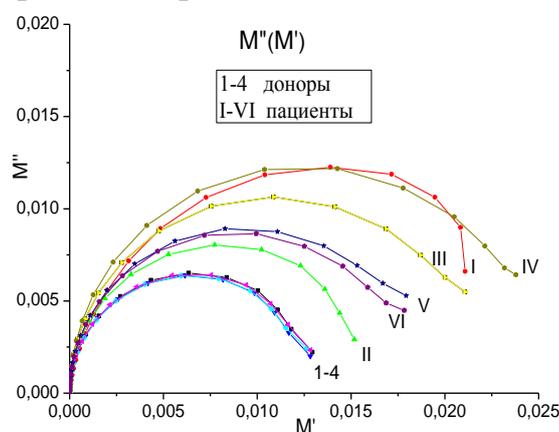


Рис. Диаграмма Коула – Коула электрического модуля $M''(M')$ для доноров и пациентов.
I–4 – доноры; I–VI – пациенты

Для пациентов наблюдается увеличение времени релаксации макромолекул, что, вероятно, связано с изменением формы белков в составе сыворотки крови. Релаксационные параметры: ширина спектра α , степень симметрии γ , время релаксации τ определяли методом аппроксимации экспериментальных данных уравнением Гаврильяка – Негами для электрического модуля [2].

1. Hallek M., Cheson B.D., Catovsky D. *et al.* 2018 *Blood* 131(25) pp. 2745–60.

2. Tsangaris G.M., Psarras G.C., Kouloumbi N. 1998 *Journal of Material Science* 33(8) pp. 2027–37.

Исследование структур CBS-пирофосфатаз из разных источников методом малоуглового рентгеновского рассеяния

Е. Ю. Сошинская¹, Л. А. Дадинова¹, В. А. Анашкин², Э. В. Штыкова¹

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

² Научно-исследовательский институт физико-химической биологии им. А. Н. Белозерского МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Растворимые неорганические пирофосфатазы (PPases) являются распространенными ферментами и играют ключевую роль в регулировании скорости гидролиза пирофосфата и баланса биосинтетических реакций [1]. В настоящее время достигнуты большие успехи в изучении структур и механизма действия неорганических пирофосфатаз, но до сих пор остается открыт вопрос о структурных особенностях PPase семейства II с регуляторной вставкой, содержащей пару CBS-доменов (названы в честь цистатионин β-синтазы, где впервые были обнаружены). Важно, что большинство бактерий, содержащих PPase семейства II, являются патогенными. Поэтому изучение свойств, в том числе структурных, необходимо для выработки стратегии борьбы с этими патогенами.

В данной работе были получены структурные характеристики CBS-PPases из *D. hafniense*, *E. lenta* (является патогенной) и *E. harbinense* в растворе методом малоуглового рентгеновского рассеяния. Способ утилизации пирофосфата (PPi) у PPases из разных организмов происходит схожим образом, но dh-PPase (*D. hafniense*) содержит DRTTG домен, а у el-PPase (*E. lenta*) и eh-PPase (*E. harbinense*) он отсутствует. В отличие от el-PPase, eh-PPase содержит мутации в регуляторной части. Согласно литературным данным, CBS-PPase является гомодимерным белком [2]. Однако нами показано, что все три фермента в растворе присутствуют в виде тетрамеров, но при этом способ образования этих олигомеров различен.

Поскольку белки исследовались в растворе, то результаты исследования могут дать ценную информацию о новых структурных деталях в условиях, близких к физиологическим.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-34-00918.

1. T.K. Kajander, J. Kellosalo, and A. Goldman, FEBS Lett., 587, 1863–1869 (2013).

2. H. Tuominen, A. Salminen *et al.*, J. Mol. Biol., 398, 400 (2010).

Изучение структуры костей крыс при заболевании остеопорозом

В. А. Усачёв^{1,2}, С. Л. Хацко¹, Т. В. Куликова¹, М. А. Сёмкин^{1,3}, А. Н. Пирогов^{1,3}

¹ Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия

² Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³ Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Имеющиеся в литературе данные свидетельствуют, что химический состав кристаллитов, их кристаллическая структура, размер частиц, степень совершенства кристаллитов и другие структурные характеристики кости зависят от возраста кости и перенесенных болезней. В нашей работе, используя рентгеновское излучение проведено предварительное исследование костей крыс разного возраста, здоровых и больных остеопорозом, чтобы установить, какие изменения происходят в параметрах атомной и субатомной структур кости. Можно ожидать, что сравнение данных позволит выяснить, какие характеристики кости изменяются с возрастом, а какие вследствие заболевания остеопорозом для выяснения причин развития остеопороза.

Крысы, имеющиеся в нашем распоряжении, это специально размножаемое для фундаментальных исследований, потомство. Остеопороз – заболевание, понижающее плотность костей и, вызывающее их утончение, что резко увеличивает хрупкость костей [1, 2]. Принято считать, что основной причиной, вызывающей понижение плотности кости, является уменьшение в ней содержания кальция. Кроме того, важно также содержание кремния, который придает эластичность костям. Тогда, повышение хрупкости кости с возрастом можно объяснить потерей в ней кальция и кремния. Чтобы контролировать качество кости, можно оценить изменение ее плотности со временем (возрастом). Понижение плотности кости указывает на ее заболевание остеопорозом. Очевидно, что в этом случае нельзя получить информацию о причинах заболевания, о развитии болезни, изменении параметров, характеризующих качество кости и т. п.

Наши предварительные данные позволяют ожидать, что кость животного имеет, в основном, кристаллическую структуру, описываемую гексагональной пространственной группой $R\bar{6}3/m$. Объем элементарной ячейки больной остеопорозом кости примерно на 1 % больше, чем в случае здоровой кости. Увеличение объема элементарной ячейки среди других причин может быть вызвано понижением плотности кости, даже если концентрация кальция в кости не уменьшается.

1. G.J. Tortora, Chapter 5: Histology of bone tissue, in: *Principles of Human Anatomy* // Harper Collines College Publishers, NY (1995) 796.

2. Matthew J. Olszta, Xingguo Cheng, Sang Soo Jee *et al.* Bone structure and formation: A new perspective // *Material Science and Engineering*. 58 (2007) 77–116.

The formation of water crystals during cooling of monoolein/hemoglobin/salt/water system

I. Baranova^{1, 2}, *A. Angelova*³, *W. Shepard*⁴, *J. Andreasson*¹, *B. Angelov*¹

¹ *Institute of Physics, ELI Beamlines, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Republic*

² *MFF, Charles University, Prague, Czech Republic*

³ *Institut Galien Paris-Sud, Université Paris-Sud, Université Paris–Saclay, Châtenay-Malabry, France*

⁴ *Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint Aubin, Gif-sur-Yvette, France*

Lipid membranes exhibit a remarkable capacity for deformation in response to different stimuli. Changes in membrane curvature under the influence of environmental factors and guest molecules have prospective applications in the design of stimuli-responsive nanomaterials and understanding of disease pathways and regeneration mechanisms in living cells [1]. Lipid cubic phases (LCPs) have been successfully used for the crystallization of important membrane proteins. Water plays a crucial role in this process. Cryo-cooling conditions are applied during the exposure of the LCP-grown crystals in the X-ray beam. It has been shown that water molecules can form crystals of various symmetries during the freezing process. In the present work we investigated the kinetics of ice formation in a hemoglobin/monoolein/salt/water LCP system by XRD under continuous flow of liquid nitrogen fluid (cryo-streaming). It was shown that first ice crystals of the cubic phase were formed, and after that hexagonal ice crystals appeared.

Acknowledgement: This work was supported by the project Advanced research using high intensity laser produced photons and particles (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000789) from European Regional Development Fund (ADONIS).

1. A. Angelova, V.M. Garamus, B. Angelov, Z. Tian, Y. Li, A. Zou, *Adv. Coll. Interface Sci.* 331–345, 249 (2017).

РККИ-взаимодействие в полуметаллах с несимморфной симметрией

Ю. В. Барамыгина^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

В работе рассматривается косвенное обменное взаимодействие между локализованными моментами в вейлевских полуметаллах с несимморфной симметрией. Эти материалы интересны для изучения, так как обладают некоторыми топологическими свойствами, благодаря присутствию точек повышенной симметрии в зоне Бриллюэна. В этих точках касаются валентная зона и зона проводимости. Частным случаем таких полуметаллов являются полуметаллы Дирака [1, 2].

Мы будем рассматривать случай двумерных дираковских полуметаллов. В их кристаллической решётке существуют высокосимметричные точки, называемые дираковскими точками. Предлагается изучить вопрос на основе простейшей модели двумерной кристаллической решётки, обладающей несимморфной симметрией. Это квадратная кристаллическая решётка с двумя типами атомов в элементарной ячейке. Гамильтониан, описывающий электронную структуру в такой системе в приближении сильной связи, был предложен в работе [1]. Этот гамильтониан взят за основу для расчёта РККИ-взаимодействия в нашей работе.

Для вычисления РККИ-взаимодействия необходима координатная зависимость неоднородной статической восприимчивости. Она представляется в виде интеграла по всем частотам от квадрата функции Грина [3]. В данной работе предложен вывод аналитических выражений для вкладов в функцию Грина от окрестностей дираковских точек. Сумма этих вкладов даст полную функцию Грина, которую можно использовать для расчёта РККИ-взаимодействия.

Подобные вычисления были проделаны ранее для графена [4], что является более простым случаем, так как там отсутствует спин-орбитальное взаимодействие.

1. S.M. Young, C.L. Kane, Dirac semimetals in two dimensions. Phys. Rev. Lett., 115, 126803 (2015).
2. P.G. Matveeva, D.N. Aristov, D. Meidan, D.B. Gutman. Edge states in a two-dimensional non-symmorphic semimetal. Phys. Rev. B, 99, 075409 (2019).
3. D.N. Aristov. Indirect RKKY interaction in any dimensionality. Phys. Rev. B, 55, 8064 (1997).
4. E. Kogan, RKKY interaction in graphene, Phys. Rev. B, 84, 115119 (2011).

О дислокационном АНВТ с учетом упругого взаимодействия дислокации с точечными дефектами

В. В. Дежин, И. Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Вычислено дислокационное амплитудно-независимое внутреннее трение (АНВТ) с использованием выражения для обобщенной восприимчивости дислокации [1, 2]. Получена формула

$$Q^{-1} \propto \frac{\omega B}{(10C/L^2 - \omega^2 M)^2 + \omega^2 B^2}.$$

Здесь ω – частота, B – коэффициент динамического торможения дислокации, L – длина дислокационного сегмента, C и M – эффективная жесткость и эффективная масса дислокации. В отличие от выражений, используемых в модели струны [3, 4], C и M не являются константами, так как эффективная жесткость зависит от длины дислокационного сегмента, а эффективная масса зависит от частоты. Рассмотрен случай упругого взаимодействия дислокации с точечными дефектами. Считалось, что расстояние d от точечного дефекта до плоскости скольжения дислокации может быть отлично от нуля. При этом происходит перенормировка величин B , C и M с помощью коэффициента χ . Если точечные дефекты расположены на линии дислокации, то $\chi=1$. При увеличении расстояния между дислокацией и точечными дефектами $\chi \rightarrow 0$. Из построенных зависимостей (см. рис.) видно, что при увеличении d пик внутреннего трения увеличивается и смещается влево.

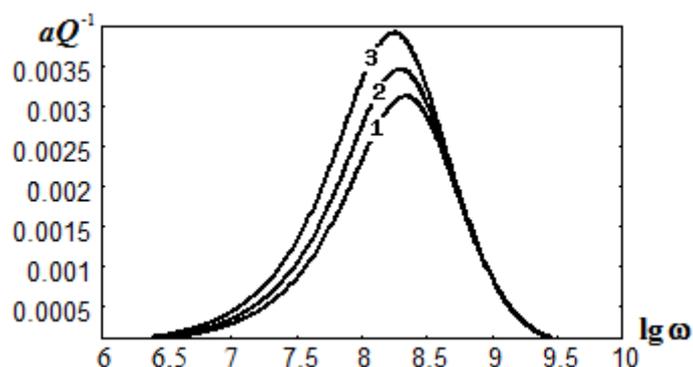


Рис. Зависимость внутреннего трения от логарифма частоты (1 – $\chi=1$, 2 – $\chi=0.8$, 3 – $\chi=0.7$), параметр a зависит от материала

1. И. Л. Батаронов и др. Изв. РАН. Сер. физ. 57(11), 97 (1993).
2. И. Л. Батаронов и др. Изв. РАН. Сер. физ. 59(10), 60 (1995).
3. J.S. Koehler. Imperfections in nearly perfect crystals. 197–216 (NY: Wiley, 1952).
4. A. Granato, K. Lücke. J. Appl. Phys. 27, 583 (1956).

Применение теории случайных коррелированных матриц для описания колебательных свойств неупорядоченных систем

Д. А. Конюх^{1, 2}, Я. М. Бельтюков¹

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

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

Нахождение общих колебательных свойств аморфных диэлектриков (стекло) является одной из ключевых задач физики неупорядоченных систем. Известно, что доминирующую часть колебательного спектра аморфных систем занимают делокализованные колебания, распространяющиеся посредством диффузионной передачи энергии [1]. Механизм этих колебаний, *диффузонов*, является крайне малоизученным. Кроме этого, практически во всех стеклах наблюдается избыточная, по сравнению с дебаевской, плотность колебательных состояний, называемая *бозонным пиком*. Природа этого явления также остается неизвестной. Во многих работах отмечается, что бозонный пик появляется на границе фононной и диффузионной областей, а его частота линейно коррелирует с частотой Иоффе – Регеля.

Для объяснения этих особенностей необходимо применение новых подходов, позволяющих получить аналитические выражения колебательного спектра аморфных, неупорядоченных сред. Одним из таких подходов является использование теории коррелированных случайных матриц. Можно считать динамическую матрицу системы до некоторой степени случайной и представить ее в виде $M=AA^T$, где случайная матрица A описывает взаимодействие атомов системы. Такое представление обеспечивает механическую устойчивость системы. Условие трансляционной симметрии делает элементы матрицы M коррелированными, что приводит к задаче о нахождении статистических свойств коррелированного ансамбля Вишарта AA^T . Поскольку собственные значения динамической матрицы M являются квадратами собственных частот, распределение собственных чисел определяет плотность колебательных состояний.

В рамках описанного подхода нам удалось найти аналитические выражения для важнейших понятий в теории колебаний, таких как плотность колебательных состояний и динамический структурный фактор. Анализ полученных выражений показывает, что существуют две принципиально разные области колебательного спектра, разделенные частотой бозонного пика, которая играет роль кроссовера [2]. Найденные зависимости находятся в хорошем согласии с полученными ранее численными результатами [3].

1. P.V. Allen, J.L. Feldman *et al.*, Phil. Mag. В 79, 1715 (1999).

2. D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov, J. Phys.: Conf. Ser. 1391, 012118 (2019).

3. Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin, Phys. Rev. В 87, 134203 (2013).

Основные состояния и возбуждения во фрустрированных магнетиках

П. А. Максимов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Фрустрация – невозможность одновременно удовлетворить различным взаимодействиям – приводит к экзотическим основным состояниям магнитных диэлектриков, сильному взаимодействию магнонов и, в крайних случаях, к полному отсутствию дальнего порядка (т. н. спиновой жидкости). Такая ситуация может возникнуть как из особенностей решетки, так и из-за анизотропных взаимодействий. Яркими примерами являются системы на треугольной и гексагональной решетках. Именно модель Гейзенберга на треугольной решетке была первым кандидатом иметь спиновую жидкость как основное состояние [1]. А анизотропная модель на гексагональной решетке, предложенная Алексеем Китаевым [2], является точно решаемой, не содержит дальнего порядка и имеет фермионы Майораны в качестве элементарных возбуждений. Но даже если магнитный материал упорядочивается, в таких системах его возбуждения магноны являются сильно взаимодействующими, что приводит к интересным эффектам, таким как перенормировка спектра и уширение линий из-за самопроизвольного распада. Мы рассмотрим недавние примеры экспериментов и теоретических моделей для подобных фрустрированных магнитных систем.

1. P.W. Anderson, Materials Research Bulletin 8, 153 (1973).
2. A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006), January Special Issue.

Магнитная анизотропия ультратонких слоев системы «графен – железо» на подложке нитрида бора (h-BN)

Е. К. Михайленко^{1,2}, С. М. Дунаевский^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Благодаря уникальности свойств графена и перспективности использования в спинтронике эффектов спиновой фильтрации [1] и гигантского магнетосопротивления [2], присущих структурам с участием графена, интерфейс графен-ферромагнитный металл стал в последние годы объектом повышенного внимания. Проведенные исследования показали, что контакт графена с ферромагнетиком может не только индуцировать магнетизм графена [3–6], но и изменять магнитные свойства подложки.

В данной работе из первых принципов в рамках теории функционала плотности (реализованной в пакете QUANTUM ESPRESSO [7]) исследуется возможность существования перпендикулярной магнитной анизотропии в системах «графен – железо» (железо с нестандартной структурой гранецентрированного никеля), подложкой для которых выступает гексагональный нитрид бора (h-BN). Рассматриваются модели, соответствующие трём типам взаимного расположения слоя железа (111) относительно графена, а также трём типам расположения железа относительно нитрида бора. Число монослоёв железа в исследуемых структурах – от 1 до 6. Толщина подложки нитрида бора везде равна 6 монослоям.

Одними из результатов расчёта являются величины разности полной энергии (зонной и магнитного дипольного взаимодействия) суперячеек, соответствующих перпендикулярному или параллельному подложке направлению суммарного магнитного момента. В работе теоретически предсказывается возможность существования перпендикулярной магнитной анизотропии для всех исследуемых систем с толщиной 3–5 монослоёв, а для некоторых систем и с большей толщиной. Сравняются также и величины энергий множеств структур с одним и тем же числом монослоёв железа.

1. V.M. Karpan, G. Giovannetti, P.A. Khomyakov *et al.* // Phys. Rev. Lett. 2007, V. 99, 176602.
2. O.V. Yazyev, A. Pasquarello // Phys. Rev. B 2009, V. 80, 035408.
3. M. Weser, Y. Rehder, K. Horn *et al.* // Appl. Phys. Lett. 2010, V. 96, 012504.
4. M. Weser, E.N. Voloshina *et al.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, V. 13, 7534.
5. H. Vita, St. Bottcher, P. Leicht *et al.* // Phys. Rev. B 2014, V. 90, 165432.
6. R. Decker, J. Brede, N. Atodiresei *et al.* // Phys. Rev. B 2013, V. 87, 041403.
7. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme *et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter 2017, V. 29, 465901.

Структурный фазовый переход в VSe₂: энергетика, магнетизм, электронная и фононная структуры

*Г. В. Пушкарев¹, В. Г. Мазуренко¹, В. В. Мазуренко¹,
Д. В. Бухвалов^{1,2}*

¹ *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

² *Нанкинский университет, Нанкин, Китай*

Однослойный VSe₂ является одним из наиболее интересных представителей группы квазидвумерных дихалькогенидов переходных металлов. Данный материал привлек внимание научной общественности благодаря нескольким недавно открытым свойствам: пьезоэлектрический эффект в плоскости [2], псевдощель в районе ферми-арки (окрестность диагонального (nodal) сектора зоны Бриллюэна) при температурах выше перехода в состояние с волнами зарядовой плотности (~ 220 К для монослоя [3]) и др.

Нами были проделаны первопринципные расчеты электронной структуры данного материала и промоделирован путь структурного перехода, график зависимости энергии от угла поворота верхнего слоя атомов Se изображен на рисунке.

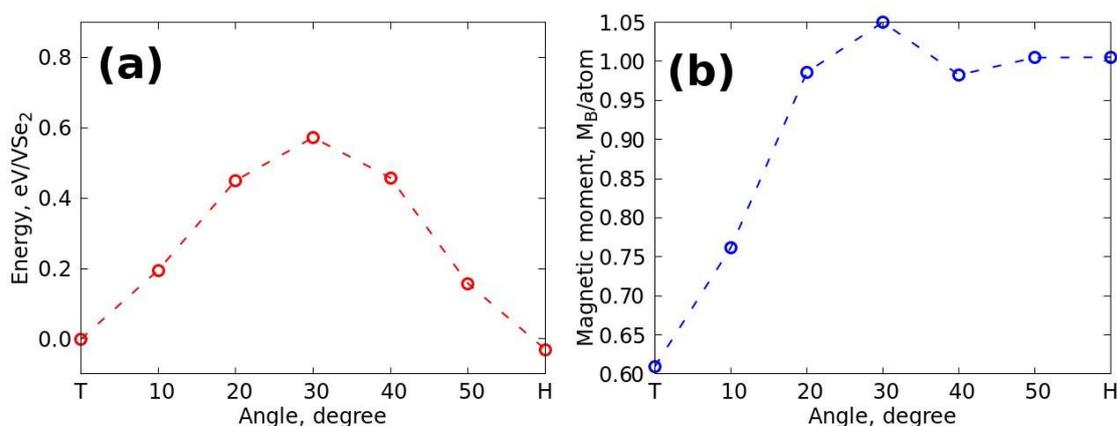


Рис. Изменение полной энергии (a) и магнитного момента (b) в зависимости от угла вращения верхнего слоя атомов Se в монослое VSe₂

Данные зависимости демонстрируют, что энергетический барьер между различными структурами решетки является относительно небольшим (~ 0,6 эВ), более того, повороты атомов на углы менее 10 градусов обладают еще меньшими энергиями, что требует учета данного факта при реалистичном описании данного материала и проектировании устройств на его основе.

1. G.V. Pushkarev, V.G. Mazurenko, V.V. Mazurenko, and D.W. Boukhvalov, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, 21, 22647–22653.
2. J. Yang, A. Wang, S. Zhang, J. Liu, Z. Zhong, and L. Chen, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, 21, 132–136.
3. P. Chen, W. Pai, Y. Chan, V. Madhavan, M. Chou, S. Mo, A. Fedorov, and T. Chiang, Physical Review Letters, 2018, 12, 196402.

Квантовые наноскирмионы

*О. М. Сотников¹, В. В. Мазуренко¹, J. Colbois², F. Mila²,
М. И. Кацнельсон^{1, 3}, Е. А. Степанов^{1, 4}*

¹ *Физико-технологический институт УрФУ, Екатеринбург, Россия*

² *Institute of Physics, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland*

³ *Radboud University, Institute for Molecules and Materials, Nijmegen, The Netherlands*

⁴ *Institute of Theoretical Physics, University of Hamburg, Hamburg, Germany*

В настоящее время скирмионы активно исследуются в области спинтроники, где эти стабильные магнитные структуры предлагается использовать в качестве бит в магнитных запоминающих устройствах [1, 2]. Существенный прогресс в развитии устройств сверхплотного хранения данных стимулировал экспериментальные исследования скирмионов, с характерным размером порядка нескольких нанометров [3]. На таком малом масштабе по сравнению с постоянной решётки невозможно пренебрегать квантовыми эффектами. В частности, это касается квантовых систем с малым спином (например, $S = 1/2$), где квантовые флуктуации играют существенную роль.

В данной работе впервые вводится концепция квантового скирмиона, которая основана на численном решении квантовой задачи, описываемой спиновым Гамильтонианом, содержащим обменное слагаемое, взаимодействие Дзялошинского – Мория и взаимодействие с магнитным полем. Так, классический скирмион можно рассматривать как частную реализацию более сложного квантового состояния, для характеристики которого был введён квантовый аналог скирмионного числа. Вычисление данной величины для сверхячеек квадратной (25 спинов) и треугольной (19 спинов) решёток показало, что она может служить индикатором скирмионного состояния, как на классическом, так и на квантовом уровне рассмотрения, что так же подтверждается расчётом магнитных структурных факторов. Детали данного исследования опубликованы в работе [4].

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-12-00185), Нидерландской организации по научным исследованиям (NWO) и Швейцарского национального научного фонда (SNSF).

1. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotechnol. 8, 152–156 (2013).
2. R. Tomasello *et al.*, Sci. Rep. 4, 6784 (2014).
3. S. Heinze *et al.*, Nature Physics 7, 713 (2011).
4. O. M. Sotnikov, V.V. Mazurenko *et al.*, arXiv:1811.10823.

Упругие свойства киральных кристаллов с точки зрения микрополярной теории

А. А. Терещенко¹, J. Kishine², А. С. Овчинников^{1, 3}, Вл. Е. Синуцын¹

¹ *Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия*

² *Division of Natural and Environmental Sciences, Open University of Japan, Chiba, Japan*

³ *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Киральность уже много десятилетий играет важную роль в физике, оптике, химии, биологии и медицине. В качестве примеров можно привести оптическую активность и круговой дихроизм, исключительно правосторонние нити двойной спирали ДНК и действие лекарств в зависимости от киральности молекул. Согласно общепринятому определению, объект является геометрически киральным, если он не обладает центросимметричностью, зеркальной симметрией и вращательно-отражательной симметрией. При этом выглядит достаточно удивительно, что понятие киральности в теории упругости оставалось в течение многих лет в тени, хотя в последнее время ситуация кардинально меняется и эта характеристика активно используется при описании новых функциональных материалов [1].

В данной работе мы рассмотрели возбуждение упругих волн в нецентросимметричных кристаллах гексагональной симметрии в рамках микрополярной теории [2]. Она позволяет естественным образом определить внутренние степени свободы, связанные с геометрической киральностью, и рассмотреть их динамику, что приводит к интересным результатам.

Мы предполагаем, что для соединения CrNb_3S_6 , помимо обычных смещений, возможно ввести внутреннюю степень свободы – вектор угла поворота внутренних частей элементарной ячейки, а именно, октаэдрического комплекса CrS_6 , поскольку связи Cr-S оказываются короче связей Nb-S.

Применение формализма микрополярной теории дает уравнения движения для полей смещений и углов поворота. Это позволяет получить дисперсионные соотношения для линейных возбуждений в виде плоских волн. Оказывается, что полученный спектр обладает интересными свойствами: при нулевом волновом векторе существуют дополнительные ненулевые частоты, щелевые возбуждения, связанные с вращательными модами; спектр демонстрирует свойство невзаимности при изменении знака волнового вектора. Кроме того, обнаружен «ротонный» эффект смягчения акустической моды, связанный с гибридизацией волн смещений и локальных вращений. Введение циркулярных компонент позволяет «расцепить» уравнения движения, что позволяет ввести понятие «спина» у возникающих фононов. В рамках микрополярной теории также удастся естественным образом ввести понятие фононного орбитального момента.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00769 мол_a и Фонда содействия развитию теоретической физики и математики BASIS 17-11-107.

1. Frenzel T. *et al.* Ultrasound experiments on acoustical activity in chiral mechanical metamaterials. *Nature communications* 10.1 (2019).
2. A.C. Eringen, *Microcontinuum Field Theories: I. Foundations and Solids* (Springer-Verlag, New York, 1999).

Спиновая динамика магнитных структур в присутствии скирмионов

В. Е. Тимофеев^{1, 2}, Д. Н. Аристов^{1, 3}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

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

Скирмионы являются топологически нетривиальными конфигурациями локальной намагниченности в различных магнетиках. В работе [1] было впервые показано существование решений с ненулевым топологическим зарядом для нелинейной $O(3)$ сигма-модели, описывающей двумерную ферромагнитную плёнку, а в последнее десятилетие в связи с экспериментальным обнаружением соединений, в которых существуют как отдельные скирмионы, так и скирмионные решётки, интерес к такого рода объектам неуклонно растёт [2].

Как правило динамика намагниченности в непрерывных моделях описывается уравнением Ландау – Лифшица, которое можно рассматривать как уравнение Эйлера – Лагранжа для Лагранжиана с соответствующим кинетическим членом. Полученный Лагранжиан мы переписываем при помощи метода стереографической проекции в терминах функции комплексного переменного. В работе [3] была показана эффективность применения подобного подхода для описания различных конфигураций, содержащих скирмионы, в том числе решёток скирмионов. На языке стереографической проекции наличие скирмиона в системе эквивалентно появлению дополнительного полюса функции, описывающей конфигурацию.

Первая вариационная производная рассматриваемого Лагранжиана позволяет найти оптимальную статическую конфигурацию намагниченности системы, в то время как вторая вариация позволяет написать уравнение на отклонения от статического решения. Уравнение является аналогом уравнения Шрёдингера для частицы в присутствии специфических векторного и скалярного потенциалов, определяемых формой статического фона.

Наш подход позволяет рассмотреть уравнение в наиболее общем виде, не привязываясь к конкретной симметрии конфигурации, таким образом появляется возможность рассматривать спиновую динамику одного или нескольких скирмионов, а также динамику решётки скирмионов. Помимо описания общего подхода в работе будет рассмотрен спектр спиновых волн в присутствии решётки скирмионов.

1. Belavin A.A., Polyakov A.M., JETP Letters 22.10 (1975).

2. Nagaosa N., Tokura Y., Nature Nanotechnology 8, 899 (2013).

3. Timofeev V.E., Sorokin A.O., Aristov D.N., JETP Letters 109.3 (2019).

Четырехножная спиновая трубка с фрустрирующим обменным взаимодействием: свободная энергия и определение основного состояния

А. С. Тимофеева, И. Г. Бострем, А. С. Овчинников

*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

Спиновые трубки относятся к квазиодномерным спиновым системам. Это магнетики, в которых связанные обменным взаимодействием молекулы образуют в пространстве линии или группы линий. Такие системы являются удобной моделью для теоретических исследований, а в последнее время в связи с успехами в области синтеза новых магнитных материалов представляют и практический интерес.

Спиновые трубки, в силу наличия внутренней структуры у каждой ее ступеньки, естественно, могут обладать более богатым набором уникальных магнитных свойств, чем простые цепочки.

Рассматриваемая нами спиновая система служит упрощенной моделью квазидвумерного органического ферримагнетика BiPNNbNO , синтезированного группой японских физхимиков, и в частности может быть применена при анализе его процесса намагничивания [1].

В данной работе мы ограничились изучением магнитоупорядоченного (несинглетного) состояния модели. Для этой цели был использован формализм континуального интегрирования для спиновых систем, предложенный в работе [2].

Метод континуального интегрирования позволяет решить вопрос выбора угла α , параметризующего классическую спиновую конфигурацию на кольце. Полученные профили свободной энергии имеют форму двойных ям, что делает возможным эффекты квантового туннелирования между эквивалентными классическими конфигурациями в такой системе. Это означает, что система обладает вырождением, возникающим из-за эффекта фрустрации, связанным с обменным параметром J_2 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-02-00213.

1. A.S. Ovchinnikov, V.E. Sinitsyn, I.G. Bostrem, Phys.: Condensed Matter, 24, 306003 (2012).
2. X. Plat, Y. Fuji, S. Capponi, Phys. Rev. B, 91, 064411 (2015).

Переход между фазами с дальним и ближним порядком в кубических спиральных магнетиках типа B20 с разупорядоченными связями

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

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Спиральные магнетики вызывают значительный интерес в настоящее время. В магнетиках без центра инверсии спиральный порядок может возникать за счет взаимодействия Дзялошинского – Мория. Такие системы обычно обладают крайне нетривиальными фазовыми диаграммами.

В смешанных спиральных магнетиках, например, $Mn_{1-x}Fe_xGe$ появляется дополнительная возможность изменять свойства системы, варьируя концентрацию x . В работе [1] было обнаружено, что при изменении x меняется вектор спирали, а для значения $x_c \approx 0.75$ он обращается в ноль. Концентрация x_c при этом разделяет области противоположной магнитной киральности. В похожей системе $Mn_{1-x}Fe_xSi$ было продемонстрировано [2], что при $x^* \approx 0.11$ возникает переход между фазами с дальним и ближним спиральным порядком.

Линейное изменение вектора спирали, наблюдавшееся экспериментально при малых концентрациях примесей x [3], может быть объяснено в рамках модели кубического спирального магнетика с беспорядком во взаимодействии соседних узлов [4, 5]. В частности, было продемонстрировано, что искажение магнитного упорядочения одиночным дефектом имеет вид поля диполя. При конечной концентрации дефектов усредненное по беспорядку искажение приводит к поправке к вектору спирали.

В данной работе в рамках вышеописанной модели (см. [4, 5]) был рассмотрен переход по концентрации x из фазы с дальним магнитным порядком в фазу с ближним порядком. В отличие от двумерных спиральных систем, где любая конечная концентрация дефектных связей [6] приводит к отсутствию дальнего порядка, было продемонстрировано, что переход происходит при конечной концентрации примесей. Обсуждается связь полученных результатов с доступными экспериментальными данными ([2, 3] и др.).

Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00083.

1. S.V. Grigoriev *et al.*, Phys. Rev. Lett. 110, 207201 (2013).
2. V.V. Glushkov *et al.*, Phys. Rev. Lett. 115, 256601 (2015).
3. S.V. Grigoriev *et al.*, Phys. Rev. B 97, 024409 (2018).
4. O.I. Utesov, A.V. Sizanov, and A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B 92, 125110 (2015).
5. O.I. Utesov, and A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B 99, 134412 (2019).
6. S. Dey, E.C. Andrade, and M. Vojta, Phys. Rev. B 101, 134412(R) (2020).

Классификация двумерных и трехмерных топологических магнитных структур

И. А. Яковлев, О. М. Сотников, В. В. Мазуренко

*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

Экспериментально полученные фазовые диаграммы ферромагнетиков с взаимодействием Дзялошинского – Мория, таких как $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}\text{Si}$ [1] и FeGe [2], содержат значительные переходные области между различными фазами, что порождает проблему точного определения границ. Особенно это актуально для спиновых спиралей и скирмонов при высоких температурах, так как стандартные методы, такие как расчет корреляционных функций, в данном случае не работают. Для трехмерных систем ситуация усложняется из-за наличия большего числа стабильных топологических структур [3].

Нами были предложены простые и понятные подходы для распознавания и классификации сложных неколлинеарных магнитных структур в двумерных и трехмерных материалах. Первый из них основан на применении нейронной сети прямого распространения, предложенной в работе [4] для модели Изинга, и полагается только на z проекции спинов атомов. В данном случае необходим небольшой обучающий набор магнитных конфигураций для того, чтобы безошибочно разделять ферромагнитную фазу, скирмионный кристалл и спиновые спирали, а также всевозможные их комбинации, расположенные в переходных областях фазовой диаграммы. Второй подход основан на анализе вектора, составленного из z проекций магнитных моментов атомов. Было показано, что, отсортировав компоненты данного вектора по возрастанию или убыванию, становится возможным разделение различных магнитных конфигураций даже в том случае, если их полная намагниченность совпадает. Для этого необходимо лишь построить графики соответствующих профилей намагниченности. В комбинации с простейшей нейронной сетью данный подход позволяет проводить точную фазовую классификацию, даже в случае трехмерных магнетиков в критических областях вблизи параметров перехода.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ 18-12-00185.

1. X.Z. Yu *et al.*, Nature 465, 901 (2010).
2. X.Z. Yu *et al.*, Nature Materials 10, 106 (2011).
3. F.N. Rybakov *et al.*, Phys. Rev. Lett. 115, 117201 (2015).
4. J. Carrasquilla, R.G. Melko, Nature Physics 13, 431 (2017).

Уширение рамановских пиков кристаллических наночастиц: подход в рамках функции Грина и численный расчет

С. В. Коняхин^{1, 2}, А. Г. Яшенкин^{3, 4}, О. И. Утесов^{1, 3, 4}

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский
Академический университет им. Ж. И. Алферова РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Institut Pascal, PHOTON-N2, Universite Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut
Pascal, Clermont-Ferrand, France

³ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Свойства наноразмерных частиц и их ансамблей являются темой активного научного исследования в современной науке о материалах. Среди прочего, неупорядоченные массивы (порошки и водные суспензии) наночастиц неполярных кристаллов (как полупроводниковых, так и диэлектрика алмаза) привлекают особое внимание, главным образом благодаря перспективам их применения в создании конструкционных материалов, в квантовых вычислениях, оптике, биологии, медицине.

Ранее авторами была разработана новая микроскопическая теория рамановского рассеяния света в наночастицах, лишённая проблем модели фононного конфайнмента, и было проведено сравнение её предсказаний с данными эксперимента по рассеянию на порошках детонационных наноалмазов с известными распределениями по размерам. В теории были органично совмещены гармоническое приближение для расчёта нормальных мод наночастиц и модель поляризации связей для расчёта рамановских спектров [1] с подходом, основанным на уравнении Клейна-Гордона-Фока для описания оптических фононов в наночастицах [2]. Теория успешно объяснила сдвиг частоты рамановского пика и его асимметричное уширение в наночастицах. Однако уширение линий оставалось единственным подгоночным параметром.

Данная работа посвящена изучению вклада беспорядка в кристаллической решётке наночастицы, а именно точечных дефектов – атомов другой массы и неровностей поверхности, на время жизни фононов в наночастице и уширение рамановских линий в формализме функции Грина. Предсказания теории сравниваются с данными компьютерных расчётов в рамках гармонического приближения. Получены зависимости уширения рамановской линии от размера частицы и силы беспорядка.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00069.

1. S.V. Koniakhin, O.I. Utesov, I.N. Terterov, A.V. Siklitskaya, A.G. Yashenkin, D.D. Solnyshkov, The Journal of Physical Chemistry C 122 (33), 19219–19229.

2. O.I. Utesov, A.G. Yashenkin, S.V. Koniakhin, The Journal of Physical Chemistry C 122 (39), 22738–22749.

Точное решение модели Изинга на линейной декорированной цепочке в магнитном поле

Е. С. Цуварев¹, Ф. А. Кассан-Оглы², А. И. Прошкин^{1, 2}

¹ *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия*

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

Рассматриваемая цепочка (см. рис.) описывается гамильтонианом следующего вида:

$$\mathcal{H}(s) = -J_d \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - J \sum_{j=1, d+2, \dots}^N s_j s_{j+d+1} - H \sum_{i=1}^N s_i,$$

где J_d – взаимодействие как между декорированными [1, 2] и нодальными спинами, так и между декорированными спинами, J – взаимодействие между нодальными спинами, H – величина внешнего магнитного поля, d – степень декорирования.

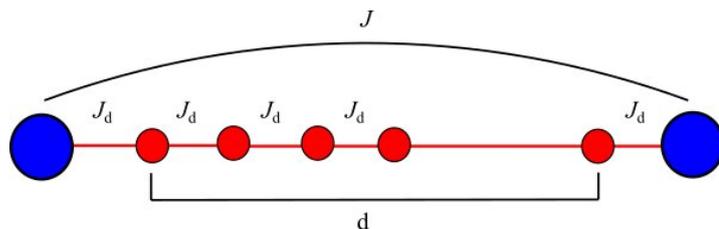


Рис. Линейная декорированная цепочка со взаимодействиями между декорированными (красные кружки) и нодальными (синие кружки) спинами J_d , а также между нодальными спинами J . Степень декорирования обозначена значком d

Решение, полученное в ходе исследования, обобщает метод трансформации Крамерса-Ваннье [3, 4] на произвольное число трансляций линейной цепочки.

Установлено, что при стремлении степени декорирования d к бесконечности, задача сводится к обычной модели Изинга на линейной цепочке в магнитном поле [5], поскольку с увеличением степени декорирования d , вклад в энергию от нодальных спинов становится все более незначительным. Кроме того, получены бесконечные ряды значений для нуль-температурных энтропий и нуль-температурных намагниченностей.

1. Syozi I., Prog. Theor. Phys. 35, 306 (1951).
2. Fisher M.E., Phys. Rev. 113, 969–981 (1958).
3. Kramers H.A. and Wannier G.H., Phys. Rev. 60, 252–262 (1941).
4. Tsuvarev E.S. *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. 1389, 012008 (2019).
5. Ising E., Zeitschrift fur Physik 21, 253–258 (1925).

Исследование спектра спиновых волн в антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость»

А. С. Щербаков¹, О. И. Утёсов^{1, 2, 3}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский

Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Квантовый магнетик $\text{NiCl}_2 \cdot 4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$, сокращенно называемый DTN (dichloro -tetrakis-thiourea-nickel), является объектом многочисленных исследований. Это вещество образует объемноцентрированную тетрагональную решетку с четкой иерархией констант обменного взаимодействия. Самым сильным обменом оказывается обмен вдоль оси с тетрагональной решётки, делая DTN квазиодномерным объектом. При низких температурах и наличии внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси с тетрагональной решётки, DTN испытывает последовательно два квантовых фазовых перехода. Первый переход из парамагнитной фазы в антиферромагнитную фазу (АФ), второй переход из АФ в полностью поляризованную фазу.

При допировании этого вещества бромом происходит частичная замена атомов хлора на атомы брома. Атомы брома, хотя и большие по размеру по сравнению с атомами хлора, не изменяют сильно межатомные расстояния, что не приводит к заметным искажениям симметрии решётки. Поэтому DTN является удобным объектом для исследования влияния беспорядка в константах взаимодействия на свойства квантовых магнетиков и в целом физики разупорядоченных бозонных систем. Фитирование спектра неупругого рассеяния нейтронов показывает, что увеличение концентрации брома приводит к увеличению констант обменного взаимодействия и одноионной анизотропии [1]. В то же время увеличение концентрации брома приводит к уменьшению щели экспериментах по спиновому резонансу (ESR) в АФ [2].

Целью работы были теоретическое исследование спектров магнонов в магнитоупорядоченной фазе и сравнение с экспериментальными результатами спинового резонанса. Для анализа спектра магнонов использовалось стандартное представление спиновых операторов Холстейна-Примакова и теория возмущений по параметру $1/S$.

В данной работе было показано, что при учете квантовых флуктуаций в первом порядке по $1/S$ появляется нелинейная зависимость спектра от параметров и появляется возможность заработать уменьшение щели в спектра, при увеличении параметров модели. Полученные результаты имеют хорошее качественное совпадение с результатами ESR [2, 3] и устраняют противоречие между данными ESR [3] и экспериментом по неупругому рассеянию нейтронов [1].

1. K.Yu. Povarov, E. Wulf, D. Hüvonen, J. Ollivier, A. Paduan-Filho, and A. Zheludev, Phys. Rev. B 92, 024429, 2015.
2. S.A. Zvyagin *et al.*, Spin dynamics of $\text{NiCl}_2\text{-4SC(NH}_2)_2$ in the field-induced ordered phase Physical Review B. 2008. V. 77. No. 9. P. 092413.
3. T.A. Soldatov, A.I. Smirnov, K.Yu. Povarov, A. Paduan-Filho, A. Zheludev, Microwave dynamics of pure and doped anisotropic $S=1$ chain antiferromagnet $\text{NiCl}_2\text{-4SC(NH}_2)_2$ arXiv:1912.00172 [cond-mat.str-el].

Theoretical and experimental developments in quantum spin liquid

V.R. Shaginyan

NRC “Kurchatov Institute” – PNPI, Gatchina, Russia

The exotic substances have exotic properties. One class of such substances is geometrically frustrated magnets, where correlated spins reside in the sites of triangular or kagome lattice. In some cases such magnet would not have long-range magnetic order. Rather, its spins tend to form kind of pairs, called valence bonds. At zero temperature these highly entangled quantum objects condense in the form of a liquid, called quantum spin liquid (QSL). The observation of a gapless QSL in actual materials is of fundamental significance both theoretically and technologically, as it could open a path to creation of topologically protected states for quantum information processing and computation. In the present review we consider QSL formed by spinons that are chargeless fermionic quasiparticles with spin $1/2$, filling up the Fermi sphere up to the Fermi momentum p_F . The excitations of QSL are spinons, which are chargeless fermionic quasiparticles with spin $1/2$. We expose a state of the art in the investigations of physical properties of geometrically frustrated magnets with QSL. As the QSL excitations are fermions, the most appropriate description of observed phenomena should be based on some fermionic formalism rather than on different forms of standard spin-wave approaches. So, one more purpose of our review centers on a theory employed, demonstrating its range of applicability to a novel expression of magnetic behavior. Unique feature of our review is to elucidate the nature of the used QSL in terms of both experimental facts and the theory of fermion condensation (FC). Our analysis, based on FC concept, permits to describe the multitude of experimental results regarding the thermodynamic and transport properties of QSL in geometrically frustrated magnets like herbertsmithite, the organic insulators, quasi-one-dimensional spin liquid, and QSL formed in two-dimensional ^3He . Based on the experimental facts and the theory, we show that the considered magnets exhibit the universal scaling behavior resembling that of heavy-fermion metals, including T/B scaling with T being temperature and B magnetic field.

Методы моделирования экспериментальных данных малоуглового рассеяния от изотропных биологических систем

В. В. Волков¹, П. В. Конарев^{1, 2}, М. В. Петухов¹

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

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

Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (МУРР) и нейтронов (МУРН) представляет собой метод получения структурной информации низкого разрешения от частично упорядоченных систем, в частности, от биологических макромолекул в растворе. За последние два десятилетия МУР стал все более распространенным методом структурной биологии, отчасти благодаря легкости, с которой МУР можно комбинировать с методами определения структуры с высоким разрешением, такими как рентгеновская кристаллография, ядерный магнитный резонанс (ЯМР) и криоэлектронная микроскопия, а также другие биофизические методы.

Биологическая значимость метода МУР повышается благодаря тому факту, что он позволяет изучать макромолекулы в условиях, близких к физиологическим, а также в условиях различных температур. Расширение доступа и совершенствование лабораторных установок МУР, а также источников синхротронного рентгеновского излучения третьего поколения способствуют росту биологического сообщества малоуглового рассеяния.

Для анализа данных МУР был разработан ряд алгоритмов, реализованных в программах пакета ATSAS [1–4], которые позволяют решать следующие задачи: (1) обработка экспериментальных данных с привлечением методов сингулярного анализа и непараметрической статистики; (2) обработка данных рассеяния регуляризационными методами, позволяющая рассчитывать размерные распределения наночастиц в изотропных дисперсных системах; (3) уникальные методы интерпретации данных рассеяния монодисперсными растворами биологических макромолекул (*ab initio* определение формы частиц, позиционирование доменов в комплексах белков, достройка неполных кристаллических структур молекул и т. д.). Работа программ пакета ATSAS показана на ряде экспериментальных и теоретических наборов данных МУР.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-90190).

1. P.V. Konarev *et al.* J. Appl. Cryst. 39, 277 (2006).
2. M.V. Petoukhov *et al.* J. Appl. Cryst. 40, s223 (2007).
3. M.V. Petoukhov *et al.* J. Appl. Cryst. 45, 342 (2012).
4. D. Franke *et al.* J. Appl. Cryst. 50, 1212 (2017).

**Протон-дейтонная станция:
измерение количества ^{10}B и ^{11}B в борированном полиэтилене**

*А. В. Гартвик, Н. Н. Губанова, А. В. Ипатов, А. Ю. Лукьянов,
К. А. Павлов, А. В. Сизов*

НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В настоящей работе были экспериментально получены и обработаны спектры ядерных реакций, протекающих в двух образцах борированного полиэтилена при бомбардировке их дейтронами с энергией 1,0 МэВ.

В работе описаны: подготовка образцов (эталонных и исследуемых), предварительная оценка параметров эксперимента (его длительности, настроек электроники, резерва по сглаживанию спектров), проведение самого эксперимента, выбор на полученных спектрах пиков для анализа, первичная оценка значений энергии пиков, определение аппаратной функции (дополнительный замер в низкоэнергетической части спектра, определение формы пиков, выбор точек для интерполяции) и, наконец, группировка пиков бора по ядрам ^{10}B и ^{11}B с последующим определением массовых долей ω изотопов в обоих образцах. Получено:

а) $\omega(^{10}\text{B}) = 3,2 \%$, $\omega(^{11}\text{B}) = 2,8 \%$;

б) $\omega(^{10}\text{B}) = 8,0 \%$, $\omega(^{11}\text{B}) = 4,4 \%$.

Электронное и программное обеспечение тестового нейтронного рефлектометра для РК ПИК

М. В. Дьячков¹, В. А. Соловей¹, М. Р. Колхидашвили¹, В. Г. Сыромятников^{1, 2},
В. А. Ульянов¹, А. Н. Рябцев^{1, 2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Основное назначение: тестирование нейтронных поляризующих и неполяризующих зеркал для создания нейтроноводов и других нейтронных оптических устройств РК ПИК.

Тестовый нейтронный рефлектометр (ТНР) временно будет размещен на горизонтальном тепловом канале ГЭК-9 реактора ПИК. На рисунке 1 представлены основные узлы ТНР:

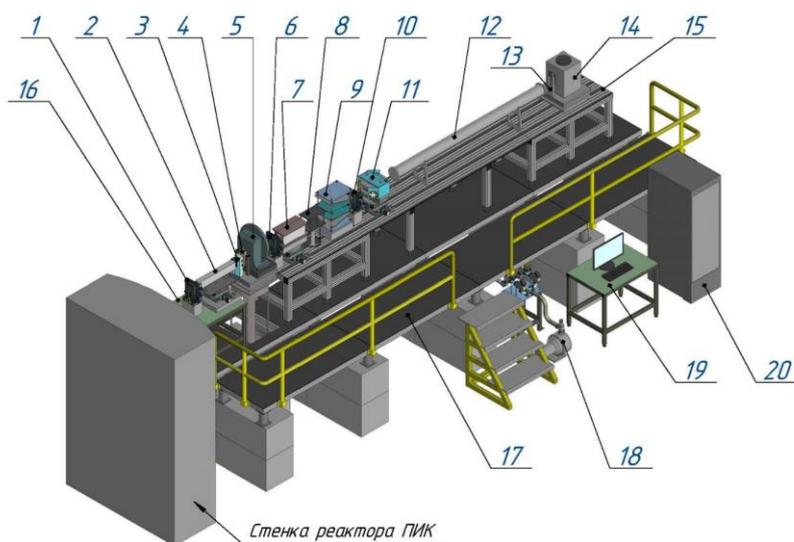


Рис. 1. 1, 6, 10 – дистанционно управляемые диафрагмы на юстировочных столах для формирования нейтронного пучка; 2 – отклоняющее (фильтрующее) пучок зеркало с коллиматором на юстировочном столе; 3 – заслонка пучка из поглощающего нейтроны материала; 4 – монитор падающего пучка; 5 – прерыватель нейтронного пучка на юстировочном столе, установлен на отдельном стапеле механически не связанном со стапелем ТНР; 7 – 4-модовый оптический формирователь (поляризатор) в постоянном магните на юстировочном столе; 8 – ведущее магнитное поле; 9 – Р/Ч флиппер; 11 – изучаемый зеркальный образец в электромагните на юстировочном столе; 12 – вакуумный тракт между образцом и детектором; 13 – дистанционно управляемая коллимационная диафрагма перед детектором; 14 – детектор нейтронов на юстировочном столе; 15 – базисная немагнитная платформа для размещения узлов ТНР; 16 – опорный виброустойчивый стапель для ТНР; 17 – опорный стапель для персонала ТНР; 18 – дистанционно управляемая вакуумная система; 19 – управляющий компьютер; 20 – шкаф с управляющей и регистрирующей электроникой

Структурная блок-схема электронного обеспечения ТНР представлена на рисунке 2:

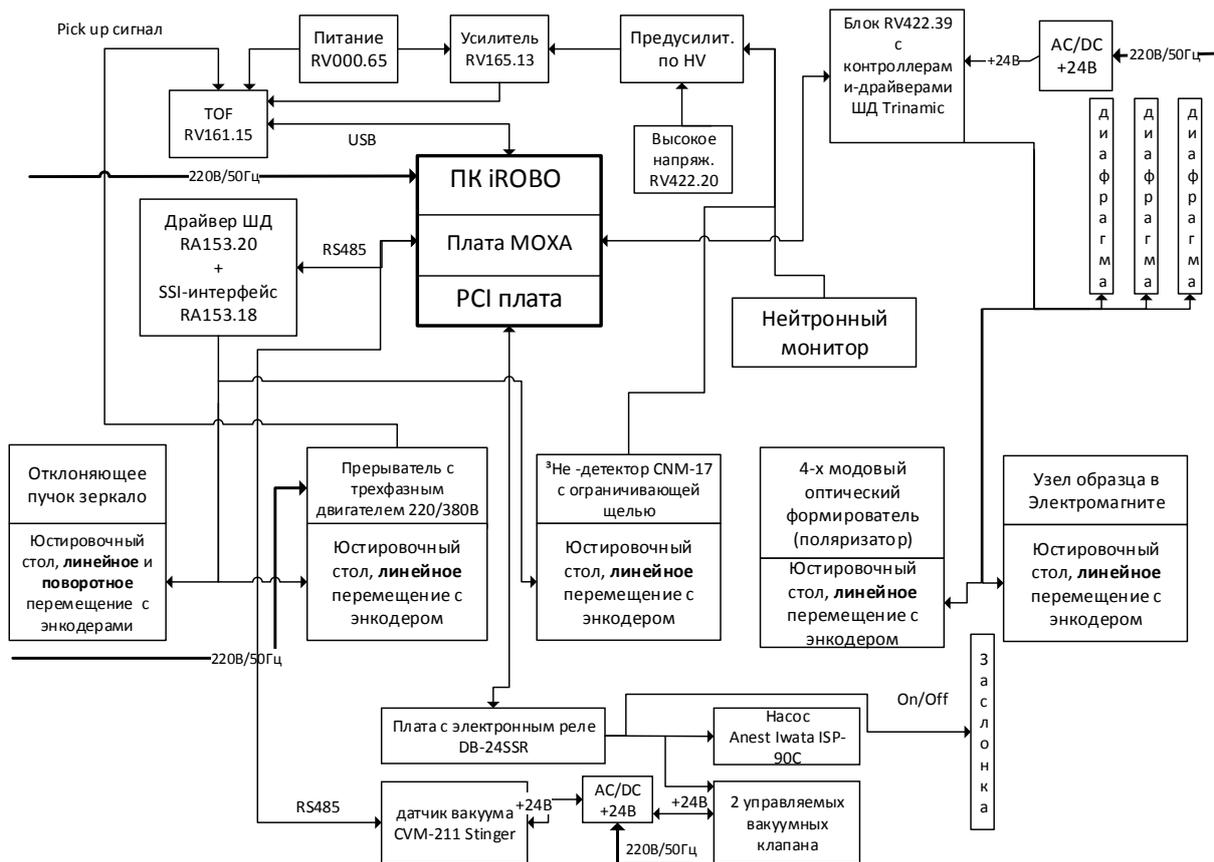


Рис. 2. Блок схема электронного обеспечения ТНР

1. М. В. Дьячков, В. А. Соловей, В. А. Ульянов и др., Журнал Поверхность № 12, с. 25–30 (2019).
2. Т. И. Глушкова, В. А. Соловей, В. А. Ульянов и др., Журнал ПТЭ № 2, с. 19–23 (2019).

Изучение структурных превращений в наносплавах TiAl и TiV при различных скоростях охлаждения

П. М. Ершов, Н. Ю. Сдобняков, Е. М. Давыденкова, В. С. Мясниченко

Тверской государственной университет, Тверь, Россия

Исследование физико-химических характеристик наночастиц отвечает одному из наиболее бурно развивающихся направлений современной науки. С фундаментальной точки зрения изучение специфических особенностей наночастиц и наносистем актуально в связи с тем, что их свойства могут существенно отличаться от характеристик соответствующих объемных фаз в связи с наличием особенностей в структурных превращениях в процессах плавления и последующей кристаллизации. В данной работе методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи [1, 2] исследуются структурные превращения при охлаждении от 1000 К до 200 К в наносплавах *TiAl* и *TiV* эквиатомного состава с числом частиц $N = 500$ при различных скоростях охлаждения U (-4.0; -2.0; -1.0; -0.5; -0.25; -0.1; -0.05; -0.025; -0.01; -0.005 К/пс). Функция радиального распределения $g(r)$ широко используется для описания атомной структуры в аморфном, жидком и кристаллическом состояниях. В рамках данной работы мы определяли значения температуры стеклования (glass formation temperature) при различных скоростях охлаждения, используя эмпирический критерий, предложенный в [3]: $R_a = g_{\min} / g_{\max} = 0.14$, где g_{\min} – высота первого минимума радиальной функции распределения, g_{\max} – высота первого пика радиальной функции распределения. Данный критерий использовался и успешно апробирован, например в [4], для исследования размерных эффектов в наночастицах *Ti@Al*. На рисунке в качестве примера представлены конечные конфигурации наносплава *TiAl* (в разрезе) при двух скоростях охлаждения U .



Рис. Конечные конфигурации TiAl (атомы алюминия – светло-серые)

Исследование выполнено финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-37-70007).

1. N.A. Pan'kin, J. Exp. Theor. Phys. 118, 856 (2014).
2. M.A. Karolewski, Rad. Eff. Def. Solids. 153, 239 (2001).
3. H.R. Wendt, F.F. Abraham, Phys. Rev. Lett. 41, 1244 (1978).
4. J.P. Zhang *et al.*, Chin. Phys. B. 25, 036102 (2016).

**Протон-дейтонная станция:
оптимизация работы высокочастотного источника дейтонов**

А. В. Ипатов, А. В. Гартвик, Ю. Г. Лукьянов, А. Ю. Лукьянов

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В ходе планового техобслуживания станции изучены параметры работы высокочастотного источника частиц ускорителя Ван де Графа. Для комплексного анализа параметров источника был специально создан испытательный стенд, имитировавший генератор питания источника заряженных частиц и режимы управления источником. Стенд позволил варьировать одновременно четыре параметра: а) имитируемую мощность самого генератора; б) скорость натекания дейтерия в стеклянную разрядную камеру; в) частоту напряжения, возбуждающего разряд в камере; г) напряжение вытягивания ионов из плазмы.

В результате выполненных работ по оптимизации управления источником интенсивность пучка дейтонов, падающих на мишень-образец, увеличена с $6,2 \cdot 10^9$ до $1,0 \cdot 10^{11}$ частиц в секунду при диаметре сечения пучка 2 мм.

Кроссплатформенная автоматизация моделирования воздушного винта

Е. А. Казаков, А. А. Бондарчук, И. К. Самсонов

*Институт математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича ЮФУ,
Ростов-на-Дону, Россия*

В последнее время популярность движителей винтового типа испытывает невероятный взлёт. Наряду с ростом числа винтокрылых транспортных средств повышается актуальность сопутствующих модельных испытаний на предмет экологичности, безопасности и надёжности.

В рамках данного исследования происходят следующие итерации: сканирование реального воздушного винта, конвертация файла модели и финальная доводка. Сканирование производится на оборудовании “ATOS ScanBox 5108” и позволяет получить высокополигональную 3D-модель, точно воссоздающую реальный объект. Затем посредством авторского кода файл конвертируется в формат исходных данных среды ANSYS CFX, при этом обеспечивается центровка объекта по осям. И на конечном этапе в среде моделирования производится корректировка, сглаживание и постановка вычислительного эксперимента с применением гибридного метода конечных объёмов.

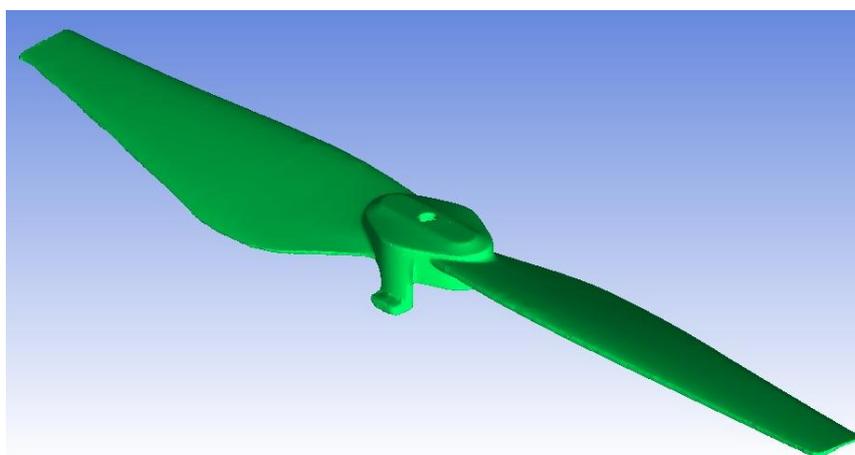


Рис. Модель воздушного винта на этапе промежуточной доводки

Применение этих методов моделирования позволит оценить вихревую пелену, создаваемую транспортным средством, и акустическую картину уровня шумов, предсказать поведение объекта в ситуациях, затруднительных для натурального эксперимента, а также выявить возможные пути усовершенствования конструкции.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 19-29-06013\19.

Расчетно-оптимизационные исследования характеристик холодного замедлителя на основе параводорода для КИН “DARIA”

*Н. А. Коваленко¹, В. В. Субботина², П. И. Коник¹,
К. А. Павлов^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

В докладе представлены результаты нейтронно-физических расчетов параводородного замедлителя в составе мишенной сборки в рамках проекта создания компактного источника нейтронов университетского типа “DARIA”. В качестве параметров оптимизации характеристик холодного замедлителя были выбраны: геометрия, форма, месторасположение в презамедлителе. Показано, что в зависимости от оптимизации под конкретный нейтронный инструмент характеристики холодного замедлителя могут различаться. Яркость параводородного источника в зависимости от указанных выше параметров может быть выше, чем для метана, что может служить обоснованием отказа от метана, как холодного замедлителя для установки малоуглового рассеяния нейтронов. При этом, следует отметить, что существуют серьезные требования к безопасности при работе с водородом, что может затруднить его применение на КИН “DARIA”.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-01074.

Моделирование плавления наночастиц

А. Г. Курицын

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Было произведено моделирование гомогенного плавления наночастиц калия разного размера в среде LAMMPS. Получены кривые нагревания и охлаждения, определена величина смещения точки фазового перехода при изменении размеров частиц, получены теплоёмкости наночастиц в области переохлаждения.

Работа ориентирована на определение границ применимости модели плавления «жидкой шубы» для сферических частиц и вопрос пока остаётся открытым.

Протон-дейтонная станция: сокращение пускового времени

А. Ю. Лукьянов, А. В. Гартвик, А. В. Ипатов, Ю. Г. Лукьянов

НИИ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В ходе настоящей работы смонтирована и введена в эксплуатацию система визуального наблюдения за элементами станции при подготовке к эксперименту и в ходе измерений, а также оптимизирована система стабилизации напряжения, ускоряющего частицы.

Система визуального наблюдения сопряжена с набором встроенных в ионопровод кварцевых маячков (кварц люминесцирует в пучке). Ее использование упростило ряд методических операций, а именно: а) позиционирование пучка в ионопроводе; б) осуществление фокусировки пучка посредством оценки его интенсивности в реальном времени; в) контроль процесса стабилизации энергии частиц в пучке.

Стабилизация ускоряющего напряжения путем подбора оптимального положения стрелы коронирующего триода в тракте пассивной стабилизации «отодвинула» значение напряжения пробоя в четыре раза с 1,05 МВ до 1,20 МВ от рабочего напряжения 1,00 МВ.

В итоге, удалось смягчить требование к электросопротивлению среды, изолирующей генератор высокого напряжения Ван де Граафа (норма снижена на 15 %), а также существенно сократить время ввода станции в рабочий режим: с 35–40 минут до 12–15 минут с момента включения ускорителя в электросеть.

Новое напылительное производство в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Е. Москвин, А. Булкин

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Петербургский институт ядерной физики (ПИЯФ) является одним из признанных производителей нейтронной оптики в мире. Напылительная лаборатория ПИЯФ одной из первых начала применять суперзеркальные многослойные покрытия при производстве нейтронных оптических приборов. Установки напыления, спроектированные в ПИЯФ 20–30 лет назад, сейчас изношены и морально устарели. Для нового высокопоточного реактора ПИК требуется порядка 500 п. м. нейтроноводов высокого качества. С другой стороны, нейтронные покрытия с необходимыми характеристиками, которые производятся современными производителями (SwissNeutronics, Mirrotron и др.), очень дорогие, и их производство ограничено. Поэтому назрела острая необходимость в создании новой установки напыления, отвечающей самым современным требованиям, а заодно и остальных дополнительных установок для организации производства компонентов нейтронной оптики.

Одной из главных задач разработчиков данного проекта станет освоение технологии изготовления нейтронных оптических узлов с параметрами, соответствующими мировому уровню. В частности, надо создать суперзеркальные покрытия с параметром m до 5. Это позволит выполнить задачи в рамках проекта и в дальнейшем удовлетворять потребности в нейтронно-оптических элементах для исследовательских нейтронных центров в России и, прежде всего, в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, на реакторе ПИК.

Реализация метода малоуглового рассеяния нейтронов на компактном нейтронном источнике

К. А. Павлов^{1, 2}, П. И. Коник¹, В. В. Воронин^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) на сегодняшний день является одним из самых востребованных методов исследования в физике конденсированного состояния вещества. Метод может быть применён для определения механических и проводящих свойств метаматериалов, поиска новых магнитных фаз и экзотических спиновых структур, исследований вихревых структур в сверхпроводниках, в разработке возобновляемых источников энергии, при синтезе супрамолекулярных полимеров и поверхностно-активных веществ с управляемым. В современных условиях повсеместного сокращения числа установок, обеспечивающих нейтронные эксперименты, важной задачей является разработка и оптимизация экспериментальной схемы реализации метода МУРН на так называемых компактных источниках нейтронов.

В данной работе рассмотрена модель простой малоугловой установки в точечной геометрии для разрабатываемого в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ и СПбГУ компактного источника DARIA. Рассчитаны параметры каскада прерывателей и оптических элементов, обеспечивающие с достаточным разрешением измерения в востребованном диапазоне. Для приблизительных расчётных параметров дана оценка нейтронного потока в позиции образца, по которой можно сделать вывод о принципиальной возможности реализации метода МУРН на компактном источнике.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-01074.

Спектрометр неупругого рассеяния нейтронов INDIGO (INDirect GeOmetry) на компактном источнике DARIA

*А. Е. Павлова^{1,2}, А. О. Петрова¹, П. И. Коник¹, К. А. Павлов^{1,2}, В. В. Воронин^{1,2},
С. В. Григорьев^{1,2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Целью данной работы является оценка возможностей установки спектрометра в обратной геометрии на компактном источнике в условиях его низкой светосилы.

Спектрометр INDIGO является частью проекта DARIA. Этот проект направлен на создание сети компактных источников в федеральных университетах, что позволит сделать исследования с помощью нейтронного рассеяния доступнее.

Задачей спектрометрии является исследование динамики образца. Так как компактный источник имеет импульсную структуру пучка, то изначально рассматривались два времяпролетных спектрометра: в прямой и обратной геометрии. Было проведено сравнение по следующим критериям: светосила на образце и максимальный объем собираемой информации. Выбор сделан в пользу времяпролетного спектрометра в обратной геометрии. Выбрана конфигурация вторичного спектрометра с позиционно-чувствительным детектором и с изогнутым анализатором, который обеспечивает захват наибольшего телесного угла. С помощью аналитических расчетов были получены основные параметры установки: длительность импульса, времяпролетная база, размеры вторичного спектрометра и его форма, угол отражения от кристаллов-анализаторов, а также диапазон переданных энергий и длин волн для исследований. С учетом всех требований к установке были получены аналитическая и смоделированная методом Монте-Карло кривые зависимости относительного разрешения от переданной энергии. Результаты показали совпадение смоделированной кривой с аналитической при учете вклада от длительности импульса и мозаичности кристалла-анализатора. Получены первые оценки нейтронного потока на образце и на детекторе.

Работа поддержана грантом РФФИ 19-12-00363 «Разработка и прототипирование нейтронных станций для компактных источников нейтронов».

Проект спектрометра неупругого рассеяния на импульсном источнике нейтронов

*А. О. Петрова^{1,2}, К. А. Павлов^{1,3}, П. И. Коник¹,
Д. Худоба^{2,3,4}, С. В. Григорьев^{1,3}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

⁴ Университет Адама Мицкевича, Познань, Польша

В настоящее время высокую актуальность имеют исследования явлений, таких, как: динамика воды в порах, транспортные свойства спиновых возмущений во фрустрированных магнетиках, адсорбция газов на поверхности, молекулярные возбуждения и другое. Одним из основных методов изучения этих явлений является неупругое рассеяние нейтронов. Этот метод реализуется на трехосных и времяпролетных нейтронных спектрометрах. Мы будем рассматривать времяпролетные спектрометры, причем в обратной геометрии, так как они охватывают большой диапазон переданных энергий за один эксперимент и могут охватывать большой телесный угол при подходящей геометрии вторичного спектрометра. Такой проект актуален как для ныне работающего импульсного источника нейтронов ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна) так и для проекта компактного источника нейтронов ДАРЬЯ.

В докладе будут подробно рассмотрены принципы расчета основных параметров спектрометра в обратной геометрии, а именно его вторичного спектрометра. Подробно будет разобрано, как каждый элемент прибора влияет на его энергетическое разрешение, как это реализуется в моделировании и соответствует ли аналитике.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-01074, а также в рамках Гранта Полномочного ПП Республики Польша в ОИЯИ, приказ № 104 от 22.02.2019, пункт б.

Компактный поляризатор нейтронов для установки МУРН «Тензор»

А. Г. Пшеничная^{1, 2}, В. Г. Сыромятников^{1, 2}

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

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Поляризатор состоит из кремниевых пластинок, покрытых суперзеркальным покрытием *CoFe/TiZr*. Нейтронно-оптический потенциал для спина нейтрона, направленного против магнитного поля для суперзеркала и для кремния не сильно отличаются, вследствие чего критический угол α_c близок к нулю, а значит, нейтроны со спином вниз летят «насквозь» и не меняют своей траектории. Однако, для нейтронов со спином по магнитному полю нейтронно-оптические потенциалы суперзеркала и материала пластины (кремний) существенно отличаются друг от друга, так что соответствующий критический угол α_c достаточно велик для той же границы (суперзеркало-материал пластины). Поэтому нейтроны со спином по полю отражаются от суперзеркального покрытия и значительно отклоняются от своих первоначальных траекторий. В результате, та часть проходящего пучка, которая распространяется вдоль оси падающего пучка, содержит значительно большее число нейтронов со спином вниз, что делает эту часть пучка сильно поляризованной.

Компактный поляризатор нейтронов на кремниевых пластинах с суперзеркальным покрытием *CoFe/TiZr* ($m = 2$) был разработан и изготовлен в ПИЯФ.

В докладе будут представлены экспериментальные результаты, полученные на рефлектометрах поляризованных нейтронов SuperADAM и D17 (ILL, Гренобль, Франция).

Кроме того, будут представлены первые результаты моделирования данного поляризатора методом Монте-Карло моделирования.

1. V.G. Syromyatnikov, V.M. Pusenkov. New compact neutron supermirror transmission polarizer. J. Phys.: Conf. Ser. 862 (2017) p. 012028 13.

2. В. Г. Сыромятников. Патент РФ № 2624633 на изобретение «Формирователь пучка с опцией поляризатора для установки малоуглового рассеяния нейтронного пучка». Приоритет изобретения 21.06.2016.

Магнитомодулированные ферромагнитные микропровода α -Fe/(PrDy)(FeCo)B

В. Сидоров^{1,2}, О. Коплак¹, И. Шапков³

¹ *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

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

³ *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия*

Новый тип микропроводов сочетающих ферромагнитное ядро α -Fe и аморфную оболочку PrDy-FeCo-B, выращенные методом экстракции висящей капли расплава, демонстрируют прямоугольную петлю гистерезиса, низкое поле переключения намагниченности (менее 100 Oe), высокую положительную магнитострикцию, что

открывает широкие возможности их практического применения [1–3].

Магнитное дипольное взаимодействие между ядром и оболочкой в микропроводах α -Fe/(PrDy)(FeCo)B исследовано с помощью магнитооптической микроскопии Керра. Были взяты микропровода одного элементного и фазового состава, но разного диаметра (< 200 мкм и >100 мкм).

При параллельной ориентации толстых микропроводов (200 мкм) вдоль магнитного поля H магнитооптическом контрасте отчетливо видны полюса с инвертированной намагниченностью, характерные для однодоменных стержневых магнитов (рис. а).

При изменении ориентации магнитного поля на поперечную происходит быстрое перемагничивание и изменение полярности микропровода (рис. б).

В случае тонкого (70 мкм) микропровода распределение намагниченности в перпендикулярном поле было схоже с диаметральной намагниченностью (рис. с). При продольной ориентации внешнего поля появляется многодоменная структура (рис. д), которая при смене полярности не меняет своего характера. Наблюдается лишь переключение намагниченности в области одного домена

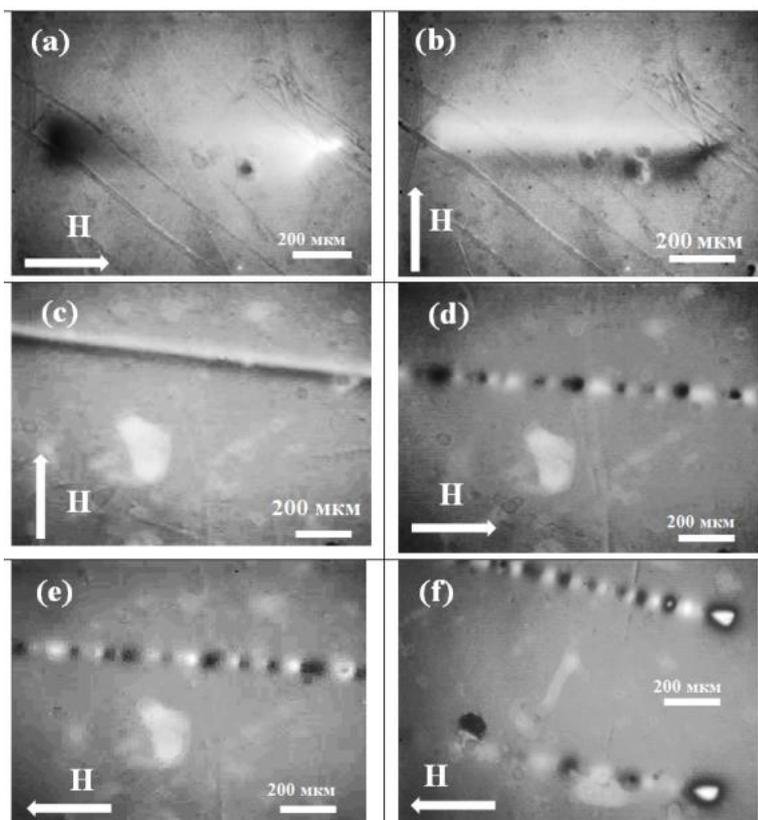


Рис. Керр-изображения толстых (a, b) и тонких (c–f) микропроводов в продольном (a, d, e, f) и поперечном (b, c) полях

(рис. е). При этом области замыкающих доменов L_{cd} (рис. f), связанные с размерами микропровода соотношением $L_c \approx 2L_{cd} = (1 - M_R/M_S) L$, были близки к расчетным значениям.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта «Стабильность» 20-32-70025.

1. R.V. Morgunov *et al.* JMMM, 497 (2020) 166004.
2. О. В. Коплак и др. ФТТ 61 (2019) 2090.
3. О. В. Коплак и др. ФТТ 62 (2020) 562.

Мобильный тестовый спектрометр (Т-спектр) для реактора ПИК

*А. В. Сизов¹, К. А. Павлов^{1,2}, А. О. Петрова¹, А. В. Гартвик¹, В. В. Тарнавич¹,
В. В. Воронин^{1,2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Тестовый спектрометр является одной из 5 установок первой очереди приборной базы реактора ПИК, работа которых планируется во время выхода реактора на мощность в 2020 году. Установка будет изначально размещена на горизонтальном экспериментальном канале ГЭК-3, и её основная задача – измерение спектра нейтронного пучка, выводимого данным каналом. После завершения научной программы на ГЭК-3 установка может быть перемещена для регистрации спектра на любой другой пучок на РК ПИК (например, на окончания нейтроноводов в нейтроноводном зале) без изменения конструкции, в чём и заключается её мобильность.

Измерение спектра будет осуществлено по методу времени пролёта, для чего установка оснащена дисковым прерывателем и детектором с разрешением по времени. Измерительный диапазон по длине волны составляет 0.5–15 Å, приборное разрешение 10 %. Сечение канала формирователя пучка (коллиматора), размер диафрагмы и щелей прерывателя и частота прерывателя подобраны для обеспечения максимальной светосилы при заданном разрешении и заданной пролётной базе прерыватель-детектор. Система управления прерывателем обеспечивает выбор произвольной частоты вращения в диапазоне 0–50 Гц, а щели прерывателя и диафрагмы легко поддаются замене. Эти два решения обеспечивают возможность варьировать как измерительный диапазон, так и разрешение. Юстировка узлов в вертикальной плоскости осуществляется в ручном режиме, в горизонтальной – в автоматическом. Монитор падающего пучка позволяет опосредованно контролировать мощность источника и нормировать измеренные данные для получения абсолютных величин. Также установка оборудована вакуумным трактом для исключения потерь нейтронного потока в ходе свободного пролёта от прерывателя до детектора.

Сравнение методик расчета яркости мишенной сборки компактного источника нейтронов DARIA

*В. В. Субботина^{1, 2}, П. И. Коник¹, Н. А. Коваленко¹,
В. В. Воронин^{1, 2}, С. В. Григорьев^{1, 2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

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

Главным фактором, тормозящим развитие нейтронных методик для исследования конденсированных сред, является недоступность источников нейтронов. Альтернативой устаревшим реакторам малой и средней мощности могут стать доступные компактные источники нейтронов. Они ускорят развитие нейтронных методик и сделают их более доступными.

Несмотря на то, что нейтронный поток в компактном источнике ниже на несколько порядков, чем в больших ускорительных станциях, это отставание компенсируется глубокой оптимизацией мишенной сборки и нейтронных каналов для каждой установки. В нейтронных установках, согласно теореме Лиувилля, важным параметром является яркость [1]. Под яркостью понимается плотность нейтронного потока в определенный телесный угол.

В работе сравнивались две методики расчета яркости: регистрация потока точечным детектором и прохождение потока через поверхность, направленного в определенный телесный угол. Расчеты проводились в программе, использующей метод Монте-Карло.

В докладе также будут представлены результаты оптимизационной работы мишенной сборки компактного источника нейтронов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-12-00363).

1. Сисакян И. Н., Шварцбург А. Б., Шепелев А. В., Компьютерная оптика, 09 (1991), с. 36–48.

ML-based analysis of X-ray absorption spectra

V.V. Pryadchenko

Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

For many years' analysis of structural characteristics of metallic nanoparticles has attracted much attention. Analysis of X-ray absorption spectra in near-edge region (XANES) differs from other methods in that it is less affected by structural and thermal long-range disorder, which improves the quality of its interpretation.

In the current study we have developed a supervised machine learning based system that takes the XANES (till ~ 100 eV above the edge) of monometallic nanoclusters as an input and predicts the average coordination numbers of the first four coordination spheres. The various ML models were trained using synthetic data obtained with the help of an Atomic Simulation Environment (ASE Python library) for modeling a range of monometallic nanoclusters and FDMNES program for theoretical simulations of corresponding XANES spectra. To improve the generalization ability of the models we have applied various of tricks for data augmentation: i) Gaussian noise to the amounts of different atomic sites forming nanoclusters and ii) non-linear transformations of XANES spectra by shifting and squeezing/stretching them which can be imagine like transformations corresponding to the uniform structural deformations of atomic clusters (*i. e.* changes of interatomic distances).

The system developed was fine-tuned within domain adaptation technique to be able to work with experimental data and will be a part of a system for multiscale diagnostics of the structure of nanocomposite materials containing mono- and bimetallic nanoparticles by means of a combination of XANES data, small-angle X-ray scattering and optical extinction spectra.

Acknowledgments. The research is supported by the "Multiscale diagnostics of the structure of nanocomposite materials containing mono- and bimetallic nanoparticles using machine learning algorithms" grant No. 18-71-00092 of the Russian Science Foundation.

Применение метода дифракции на углы близкие к обратным для изучения пьезоэффекта

П. В. Гурьева¹, Н. В. Марченков^{1,2}, А. Н. Артемьев¹,
Н. А. Артемьев³, А. Д. Беляев¹, А. А. Демкив¹, В. А. Шишков²

¹НИЦ “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

³KLA Corporation, Milpitas, CA, USA

В работе представлены измерения пьезоэлектрического модуля d_{11} монокристалла лантан-галлиевого силиката (LGS – $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) [1-3]. Пьезомодуль был измерен методом рентгеновской дифракции на углы, близкие к обратным [4]. Эксперименты в подобных схемах позволяют с высокой ($\sim 10^{-5}$ – 10^{-6}) точностью определять относительные изменения постоянной решетки в кристаллах, вызываемые, внешними воздействиями.

Эксперимент ставился на канале 6.2 Курчатовского источника синхротронного излучения (СИ). Кристаллы были выращены методом Чохральского компанией «Fomos Materials» (Moscow, Russia). Для подачи внешнего электрического поля на кристаллы были нанесены серебряные электроды толщиной 70 nm с подслоем из хрома (30 nm) для лучшей адгезии. Измерения проводились при использовании длины волны излучения $\lambda = 1.167\text{\AA}$. При выбранной длине волны угол дифракции для отражения LGS (770) составил $2\Theta=178.23^\circ$. На кристалл LGS(770) подавалось внешнее электрическое поле $(+997.7\pm 0.4)$ V и (-999.3 ± 0.4) V. Среднее значение сдвига дифракционной кривой при приложении напряжения в $+997.7$ V составило 118.5 ± 1.4 угл.с. Сдвиг при напряжении -999.3 V составил 121.2 ± 1.4 угл.с. Данным сдвигам соответствует изменение межплоскостного расстояния $\Delta d/d = 1.04\times 10^{-5}$. Пьезоэлектрические модули составили $|d_{11}|=6.32\times 10^{-12}\text{C/N}$ ($+997.7\text{V}$) и $|d_{11}|=6.53\times 10^{-12}\text{C/N}$ ($+999.3$ V). Абсолютная ошибка составила 0.08×10^{-12} C/N.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90136\19.

1. Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Emelin E.V. et al. // Russian Microelectronics. 2013. Vol. 42. Issue 8. P. 463–466.
2. Irzhak D. and Roshchupkin D. // AIP. 2013. Adv. 3. 102108.
3. Blagov A.E., Marchenkov N.V., Pisarevsky Yu.V. et al. // Crystallography Reports. 2013. Vol. 58. № 1. P. 49-53.
4. Artemiev A.N., Belyaev A.D., Artemiev N.A. et al. // Journal of Surface Investigation. X-ray. Synchrotron and Neutron Techniques. 2013, Vol. 7. No. 5. P. 916–920.

Список участников

ФИО	Организация	E-mail	Стр.
Andreev Sergueï Viktorovich	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	serguey.andreev@gmail.com	
Aliyeva Shahla Nuraddin	Institute of Physics of ANAS	Shahla-aliyeva22@rambler.ru	12
Asadullayeva Saida Qilman	Institute of Physics of ANAS	sasadullayeva@mail.ru	140
Baranova Iuliia	ELI Beamlines, CAS	jul.bar.g@yandex.ru	160
Bakradze Georgijs	University of Latvia	georgijs.bakradze@cfi.lu.lv	
Cintins Arturs	Institute of Solid State Physics, UL	Arturs.Cintins@cfi.lu.lv	51
Goukassov Arsene	Leon Brillouin Laboratory	arsen.goukassov@cea.fr	5
Ismayilova Narmin Arif	Институт физики НАН Азербайджана	ismayilova_narmin_84@mail.ru	142
Jonane Inga	Institute of Solid State Physics, UL	inga.jonane@cfi.lu.lv	52
Koplak Oksana	IPCP RAS	o.koplak@gmail.com	
Mamedova Samira Akif	ANAS	samira-1984@inbox.ru	144
Rogalev Andrei	ESRF	rogalev@esrf.fr	
Tatarinova Alisa Alexandrovna	Государственный университет «Дубна»	99_989@bk.ru	29
Van Phuc Tran	Joint Institute for Nuclear Research	tvphuc@iop.vast.ac.vn	145
Vezhlev Egor	Forschungszentrum Jülich GmbH	e.vezhlev@fz-juelich.de	40
Абасзаде Рашад Габил оглы	НАН Азербайджана	abaszada@gmail.com	
Абдулвахидов Камалудин Гаждиевич	Южный федеральный университет	phys.kam@mail.ru	53
Абдурахимов Бехзоджон Абдурахмонович	ОИЯИ	bekhzod@jinr.ru	10
Аблакатов Андрей Макарович	ОАО «Элеконд»	rishatvaleev@udman.ru	54
Аверкиев Игорь Кронидович	УдмФИЦ УрО РАН	averkiev1997@mail.ru	11
Агаева Улкар Магаиеддали	Сумгаитский государственный университет	ulkar.aqayeva86@mail.ru	55
Агаева Улкер Магамедали	Сумгаитский государственный университет	ulka_aqayeva@mail.ru	
Азарова Любовь Александровна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	azarova_la@pnpi.nrcki.ru	

Аксенов Сергей Михайлович	ИК РАН	aks.crys@gmail.com	
Алигулиева Хаяла Вагиф	Сумгаитский государственный университет	aliquliyeva.fizik@mail.ru	57
Алиева Вафа Байбала кызе	Институт физики НАН Азербайджана	vafa_neymatova@mail.ru	139
Алтынбаев Евгений Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	altynbaev_ev@pnpi.nrcki.ru	
Алыев Юсиф Имрайыл оглы	Институт физики НАН Азербайджана	yusifafshar@gmail.com	38
Амонов Мухтор Зиядуллаевич	ИЯФ АН РУз	amonov@inp.uz	
Аристов Дмитрий Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	aristov@thd.pnpi.spb.ru	
Арутюнян Александр Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	arut61@mail.ru	58
Астафьев Сергей Борисович	ИК РАН	bard@crys.ras.ru	
Байгутлин Данил Расулович	Челябинский государственный университет	d0nik1996@mail.ru	59
Бакиева Ольга Ринатовна	УдмФИЦ УрО РАН	ftiran@mail.ru	
Барамыгина Юлия Владимировна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	barjv@mail.ru	161
Безбородова Полина Александровна	Челябинский государственный университет	ibragimova-polin@mail.ru	61
Белова Ирина Вадимовна	Самарский университет	irishka3-1-1@yandex.ru	
Белогорлов Антон Анатольевич	НИЯУ МИФИ	ААBelogorlov@mephi.ru	62
Бражник Петр Александрович	НИЦ «Курчатовский институт»	xocenk@mail.ru	63
Булкин Алексей Петрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	boulkin_ap@pnpi.nrcki.ru	
Бусленко Анна Владимировна	НИЦ «Курчатовский институт»	anyabuslenko@gmail.com	146
Быков Алексей Анатольевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	redi87@bk.ru	
Валеев Ришат Галеевич	УдмФИЦ УрО РАН	rishatvaleev@mail.ru	64, 137
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	41
Васильев Александр Витальевич	МГУ им. М. В. Ломоносова	a.vasiliev@inorg.chem.msu.ru	65

Васильев Андрей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	vasilev_ai@pnpi.nrcki.ru	
Васин Денис Сергеевич	ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	d.s.vasin@outlook.com	
Ваулин Артём Александрович	ИФМ УрО РАН	artavaulin@gmail.com	13
Вдовина Евгения Константиновна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	vdovina96@list.ru	66
Виноградов Роман Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	Superbia1997@yandex.ru	
Вислогузова Анастасия Михайловна	СПбГУ	visloguzova.a@gmail.com	
Волков Владимир Владимирович	ИК РАН	vvo@ns.crys.ras.ru	179
Волков Дмитрий Вячеславович	Южный федеральный университет	werhider@yandex.ru	67
Гаврилов Сергей Викторович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gavrilov_sv@pnpi.nrcki.ru	
Гарибли Айсель Физули	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	talibli_aysel@mail.ru	
Гартвик Андрей Витальевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gartvig_av@pnpi.nrcki.ru	181
Гасанзаде Илаха	Сумгаитский государственный университет	khayala.biznes81@gmail.com	68
Гасанов Рамин Айяр	Институт систем управления НАН Азербайджана	ramingasanov@mail.ru	147
Гасанова Хаяла Аждар	Институт физики НАН Азербайджана	rasulova.khayala@mail.ru, rasulova.kahayalaz@mail.ru	
Герашенко Олег Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gerashchenko_ov@pnpi.nrcki.ru	
Герега Василиса Александровна	РГПУ им. А. И. Герцена	gerega.vasilisa96@gmail.com	69
Глазунова Екатерина Викторовна	НИИ физики ЮФУ	kate93g@mail.ru	70
Голощачов Дмитрий Леонидович	Воронежский государственный университет	goloshchapov@phys.vsu.ru	149
Гордеева Елена Олеговна	МГУ им. М. В. Ломоносова	elenagordeeva_fnm@mail.ru	71
Гребенников Владимир Иосифович	ИФМ УрО РАН	vgrebennikov@list.ru	50
Григорьев Сергей Валентинович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	Grigoryev_SV@pnpi.nrcki.ru	4

Григорьева / Grigoryeva Наталья / Natalia Анатолевна	СПбГУ	n.a.grigorieva@spbu.ru	
Губанова Надежда Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	gubanova_nn@pnpi.nrcki.ru	72
Гусейнов Гусейн Джалил оглу	НАН Азербайджана	huseyn-1978@mail.ru	138
Дворецкая Елизавета Витальевна	Институт проблем химической физики РАН	dvoretskaya95@yandex.ru	73
Дегтяренко Алёна Юрьевна	НИЦ «Курчатовский институт»	ALevakhova@gmail.com	74
Дежин Виктор Владимирович	Воронежский государственный технический университет	viktor.dezhin@mail.ru	162
Дмитренко Иван Павлович	Южный федеральный университет	vanekdmitrenko@gmail.com	75
Дмитриев Артем Владимирович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	dmitrievav@mail.ioffe.ru	150
Дремова Елена Витальевна	ИПХФ РАН	Betta_hat@mail.ru	76
Дубицкий Илья Семенович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ilya.dubitskiy@mail.ru	77
Дубов Валерий Валерьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА	valery_dubov@mail.ru	79
Дудко Анна Владимировна	Евразийский национальный университет	acquafelice91@mail.ru	80
Дурыманов Вениамин Александрович	Южный федеральный университет	durymanov@sfedu.ru	42
Дьячков Максим Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	maximonian@yandex.ru	182
Елисеев Андрей Анатолевич	ФНМ МГУ им. М. В. Ломоносова	eliseev@inorg.chem.msu.ru	81
Елисеев Артем Анатолевич	МГУ им. М. В. Ломоносова	artem.a.eliseev@gmail.com	
Елмекави Ахмед Хассан	СПбГУ	ahmedalmekawy@ymail.com	82
Ермакова Александра Михайловна	Южный федеральный университет	ermakova.alexandra.bk@mail.ru	83
Ершов Павел Михайлович	Тверской государственный университет	nsdobnyakov@mail.ru	184
Жумаев Мустахим Рофиевич	Бухарский инженерно- технологический институт	mrjumaev2011@mail.ru	84

Жуманазаров Аллаяр Пархатдинович	Марийский государственный университет	allayar_0909@mail.ru	85
Журавлев Михаил Романович	РГГМУ	michal.zhuravliov@gmail.com	
Зайнуллин Олег Борисович	ИК РАН	OlegBZainul@yandex.ru	86
Звездкина Анна Андреевна	Самарский университет	annnazvezdkina@gmail.com	87
Зобкало Игорь Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	zobkalo_ia@pnpi.nrcki.ru	
Золотухин Дмитрий Сергеевич	Воронежский государственный университет	zolutukhinspb@gmail.com	88
Зубарь Татьяна Игоревна	ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	fix.tatyana@gmail.com	37
Иваницкий Евгений Романович	Петрозаводский государственный университет	jeeckson@yandex.ru	
Иванов Александр	ILL	aivanov@ill.fr	
Ивашевская Светлана Николаевна	ИГ КарНЦ РАН	ivashevskaja@yahoo.com	143
Ипатов Александр Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ipatov_av@pnpi.nrcki.ru	185
Ипатов Дмитрий	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	dmitrii.ipatov@rambler.ru	
Исмаилов Фасад Агабала	Сумгаитский государственный университет	fesad_sdu@mail.ru	89
Казаков Евгений Алексеевич	Южный федеральный университет	Eugene.A.Kazakov@yandex.ru	186
Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	91
Карпов Иван Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт»	idkarpov@ya.ru	14
Качоровский Валентин Юрьевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	kachor.valentin@gmail.com	
Кашин Сергей Николаевич	Ивановский государственный университет	Sergo-vaz@yandex.ru	92
Кдур Дарья Алексеевна	Самарский университет	dashakdur@gmail.com	
Кенесарин Мурат	ОИЯИ	muratkenessarinn@gmail.com	15
Киреенко Юрий Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	osnerde@gmail.com	
Киселев Игорь Анатолеевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	igkiselev@gmail.com	151
Коваленко Никита Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	kovalenko.nrcki@gmail.com	187

Коваль Ольга Юрьевна	СПбАУ им. Ж. И. Алфёрова РАН	o.yu.koval@gmail.com	93
Козлова Наталья Николаевна	ИК РАН	79647099102@yandex.ru	95
Козловский Артем Леонидович	Институт ядерной физики МЭ РК	artem88sddt@mail.ru	96
Колмаков Алексей Олегович	Институт проблем химической физики РАН	ao.kolmakov@gmail.com	97
Коморников Владимир Андреевич	ИК РАН	v.a.kom@mail.ru	98
Конарев Петр Валерьевич	ИК РАН	konarev@ns.crys.ras.ru	43
Коник Петр Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	104pet104@gmail.com	6
Коноплев Кир Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	konoplyev_ka@pnpi.nrcki.ru	
Конюх Дмитрий Александрович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	conyuh.dmitrij@yandex.ru	163
Коняхин Сергей Васильевич	СПбАУ им. Ж. И. Алфёрова РАН	roch@yandex.ru	174
Кочетков Федор Михайлович	СПбАУ им. Ж. И. Алфёрова РАН	azemerat@rambler.ru	99
Кузнецова Татьяна Владимировна	ИФМ УрО РАН	kuznetsovaups@mail.ru	
Кулишов Артём Андреевич	ИК РАН	adakyla1255@gmail.com	100
Курицын Александр Геннадьевич	СПбГУ	kuritsyn_alex@mail.ru	188
Леонтьев Алексей Павлович	МГУ им. М. В. Ломоносова	leontyevalecsey@mail.ru	101
Лизнева Дарьяна Геннадьевна	СПбГУ	daryana48@mail.ru	
Логинова Светлана Владимировна	Петрозаводский государственный университет	svlog@petsu.ru	112
Лончакова Ольга Владимировна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	la-chita@mail.ru	
Лукьянов Алексей Юрьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	lukyanov_au@pnpi.nrcki.ru	189
Магамедова Селимат Габибуллаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Самарский университет	ShakhbanovaSel@mail.ru, Selmagamedova@gmail.ru	102
Максимов Павел Александрович	ОИЯИ	maksimov@theor.jinr.ru	164
Мамедов Джавид Вахид оглы	КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН	javi-m@yandex.ru	103

Мамедова Гюнай Рафаел	Сумгаитский государственный университет	memmedovagunay718@gmail.com	
Матасов Макс Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matasov_md@pnpi.nrcki.ru	
Матвеев Василий Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	16
Матвеева Анна Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	matveeva_an@pnpi.nrcki.ru	17
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	a.mistonov@spbu.ru	7
Михайленко Евгений Константинович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	mikhailenko_ek@pnpi.nrcki.ru	165
Мойса Максим Олегович	НИИ физики ЮФУ	maksim.moysa@mail.ru	104
Москвин Евгений Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	moskvin_ev@pnpi.nrcki.ru	190
Мудровская Наталья Владимировна	ИГиП ДВО РАН	fedorova@ascnet.ru	105
Мурашев Михаил Михайлович	НИЦ «Курчатовский институт»	mihail.mmm@inbox.ru	18
Наджар Насер	СПбГУ	nasernajjar92@gmail.com	
Наумова Ангелина Александровна	Самарский университет	ang_naumova@mail.ru	
Ненашев Григорий Васильевич	СПбГЭТУ «ЛЭТИ», ИХС РАН	virison95@gmail.com	106
Николаев Илья Игоревич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	iljanikolaevstorm@mail.ru	44
Никонов Александр Евгеньевич	ВГТУ	nikonov.sasha1994@gmail.com	107
Ноян Алексей Аднанович	МФТИ	alekseynoyan@gmail.com	108
Нуркасова Ару Ержановна	ОИЯИ	yanurkasova@mail.ru	152
Обозова Екатерина Дмитриевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	oed1990@gmail.com	
Овсяников Александр Константинович	RWTH Aachen University	ovsyaniakov_a_k@mail.ru	19
Озивская Екатерина Васильевна	МГУ им. М. В. Ломоносова	ekaterinaozivskayaa@gmail.com	20
Окороков Алексей Иванович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	okorokov_ai@nrcki.ru	
Осинская Юлия Владимировна	Самарский университет	ojv76@mail.ru	

Островская Анна Андреевна	ИК РАН, МИРЭА – Российский технологический университет МИТХТ	anuta.dobraya@yandex.ru	109
Павлов Константин	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	fairy.neutrons@yandex.ru	191
Павлова Алина Андреевна	СПбГУ	alina.pavlova.htsc@gmail.com	192
Павлова Анастасия Евгеньевна	СПбГУ	pavlovanastasia668@gmail.com	
Паймеров Сергей Климентович	Марийский государственный университет	paymerov@mail.ru	110
Паламарчук Константин Витальевич	НИЦ «Курчатовский институт»	kvp1239@mail.ru	111
Петрова Анита	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ani_petrova@mail.ru	193
Петрова Наталья Сергеевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	polushin1992@gmail.com	
Петухов Максим Владимирович	ИК РАН	maxim@embl-hamburg.de	46
Платонова Корнелия Сергеевна	РГГМУ	kpc9099@gmail.com	
Плешанов Иван Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	pleshanov_in@pnpi.nrcki.ru	
Плешанов Николай Константинович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	pleshanov_nk@pnpi.nrcki.ru	
Пневская Анна Юрьевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	annpnevskaya@yandex.ru	
Покоев Александр Владимирович	Самарский университет	a.v.pokoev46@mail.ru	
Полушина Анастасия Дмитриевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	Nasarommi96@gmail.com, nasa96@andex.ru	113, 114
Пономарева Алина Александровна	ИПМ ДВО РАН	ap_k@inbox.ru	115
Попов Иван Иванович	ВГТУ	popovich_vano@mail.ru	116
Попович Ольга Сергеевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	popovich_os@pnpi.nrcki.ru	
Прядченко Василий Владимирович	Южный федеральный университет	vvpryadchenko@sfedu.ru	199
Пушкарев Георгий Владимирович	УрФУ	puskarev.g.v@gmail.com	166
Пушкарёв Сергей Сергеевич	ИСВЧПЭ РАН	s_s_e_r_p@mail.ru	117

Пшеничная Ангелина Геннадьевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	asg96@mail.ru	194
Пшеничный Кирилл Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	pshcyrill@mail.ru	21
Ревергук Анастасия Андреевна	СПбГУ	anastacia.aizenstein@gmail.com	153
Робук Виктор Николаевич	ОИЯИ	robuk@jinr.ru	154
Ростовцев Никита Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	nick.romero@bk.ru	
Рошаль Дарья Сергеевна	Южный федеральный университет	rochal.d@yandex.ru	155
Рунов Владимир Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	runov_vv@pnpi.nrcki.ru	
Рунова Майна Константиновна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	runova_mk@pnpi.nrcki.ru	
Рыжов Вячеслав Анатолевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	156
Рылов Сергей Александрович	НИЦ «Курчатовский институт»	rylovsergey25@gmail.com	22
Рябцев Александр Николаевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	Aleksandr0397@bk.ru	
Савицкая Наталья Евгеньевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	savitska@inbox.ru	8
Сальникова Жанна Андреевна	РГПУ им. А. И. Герцена	jannete90@mail.ru	157
Сапунов Георгий Андреевич	СПбАУ им. Ж. И. Алфёрова РАН	sapunovgeorgiy@gmail.com	118
Сенкевич Станислав Викторович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	SenkevichSV@mail.ioffe.ru	119
Серебренников Дмитрий Александрович	БФУ им. И. Канта	Dimafania@mail.ru	24
Серокурова Александра Ивановна	ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»	aleksa.serokurova@yandex.ua	120
Сидоров Владислав Львович	ФФФХИ МГУ им. М. В. Ломоносова	bobik_132@mail.ru	195
Сизов Александр Вячеславович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	sizoffav1@mail.ru	197
Сийдра Екатерина Николаевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	siidra.e.n@gmail.com	
Синеглазов Дмитрий Сергеевич	Самарский университет	sineglazov-dima@rambler.ru	
Сирота Марина Александровна	Южный федеральный университет	mari.sirota@ya.ru	

Сканченко Дарья Олеговна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	skanchenko_do@pnpi.nrcki.ru	25
Скоробогатов Станислав Алексеевич	ФИЦ КНЦ СО РАН	s.t.a.s.1.9.9.4@mail.ru	39
Смирнов Андрей Николаевич	ВГТУ	deadpunk@inbox.ru	121
Соколовский Григорий Семенович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	gs@mail.ioffe.ru	9
Солонинкина Мария Васильевна	Петрозаводский государственный университет	mas31393@yandex.ru	122
Сотников Олег Михайлович	УрФУ	oleg.sotn@gmail.com	167
Сотничук Степан Владимирович	МГУ им. М. В. Ломоносова	sotnya777@mail.ru	124
Сошинская Екатерина Юрьевна	ИК РАН	katuffus@rambler.ru	158
Субботина Валерия Владимировна	СПбГУ	vsubvgcb@gmail.com	198
Сундеев Роман Вячеславович	РТУ МИРЭА	sundeev55@yandex.ru	125
Сурицкий Константин Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	surinskykd@gmail.com	126
Суслов Михаил Владимирович	РГПУ им. А. И. Герцена	Mvsuslov@mail.ru	127
Суслопарова Анна Евгеньевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	susloparovanna@mail.ru	27
Сыромятников Арсений Владиславович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru	
Сёмкин Михаил Александрович	ИФМ УрО РАН	m.a.semkin@urfu.ru	23
Тарнавич Владислав Валерьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	tarnavich_vv@pnpi.nrcki.ru	
Терентьев Константин Юрьевич	Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН	molisili@mail.ru	128
Терещенко Алексей Анатольевич	УрФУ	tenxor@mail.ru	168
Тимаков Иван Сергеевич	ИК РАН	selos93@mail.ru	130

Тимофеев Виктор Евгеньевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	timofeevictor@gmail.com	170
Тимофеева Анна Сергеевна	УрФУ	anna_timofeeva@bk.ru	171
Тихонова Наталия Сергеевна	ОИЯИ	tihns00@gmail.com	
Тищенко Евгений Викторович	МГУ им. М. В. Ломоносова	ev.tishchenko@physics.msu.ru	
Улвия Гасанзаде Илгар	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Сумгаитский государственный университет	ilahahasanzade143@gmail.com	
Ульянов Владимир Александрович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ulyanov_va@pnpi.nrcki.ru	
Упорова Наталья Сергеевна	Институт геологии и геохимии УрО РАН	nuporova84@gmail.com	131
Усачёв Владимир Александрович	Институт иммунологии и физиологии УрО РАН	Usachjov-vova@mail.ru	159
Усманов Олег Вадимович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	usmanow93@gmail.com	30
Утесов Олег Игоревич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	utiosov@gmail.com	172, 176
Федина Сергей Викторович	СПбАУ им. Ж. И. Алфёрова РАН	fedina.serg@yandex.ru	132
Фокин Никита Сергеевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	nik-fokin-1996@mail.ru	133
Фокина Снежанна Игоревна	ОИЯИ	fokina_1999_12@mail.ru	
Цуварев Егор Сергеевич	УрФУ	eguny@mail.ru	175
Цыпильников Андрей Васильевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	andrei.tsypilnikov92@gmail.com	
Чен Тэсик	МИРЭА – Российский технологический университет	chen.tt@mail.ru	47
Чернецкая Мария Дмитриевна	ИЯФ СО РАН	Chernetskaya36@gmail.com	
Чубова Надежда Михайловна	НИЦ «Курчатовский институт»	chubova_nm@pnpi.nrcki.ru	
Чукавин Андрей Игоревич	УдмФИЦ УрО РАН	andrey_chukawin@mail.ru	134
Шагинян Василий Робертович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	vrshag@thd.pnpi.spb.ru	178
Шапиро Дмитрий Дмитриевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	shapiro@mail.ru	32
Шарипов Мирзо Зокирович	Бухарский инженерно-технологический институт	m.z.sharipov@rambler.ru	

Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	mischar@mail.ru	135
Шкорняков Сергей Михайлович	ИК РАН	shkornyakov@mail.ru	33
Шмайснер Йоханн	НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ	vny007@mail.ru	34
Штarkман Лев Владимирович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	shtarkmanlev@mail.ru	
Эзау Петр Давыдович	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	ezaу.petr@gmail.com	
Юзвюк Мария	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	yuzvyuk_mh@pnpi.nrcki.ru	48
Юренков Даниил Игоревич	ОИЯИ	danil_yurenkov@mail.ru	35
Яковлев Илья Александрович	УрФУ	iakovlev.ilia@mail.ru	173
Янусова Людмила Германовна	ИК РАН	yanusova@crys.ras.ru	49
Яшенкин Андрей Геннадьевич	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, СПбГУ	ayash@mail.ru	
Яшина Екатерина Геннадьевна	НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	yashina_91@inbox.ru	36